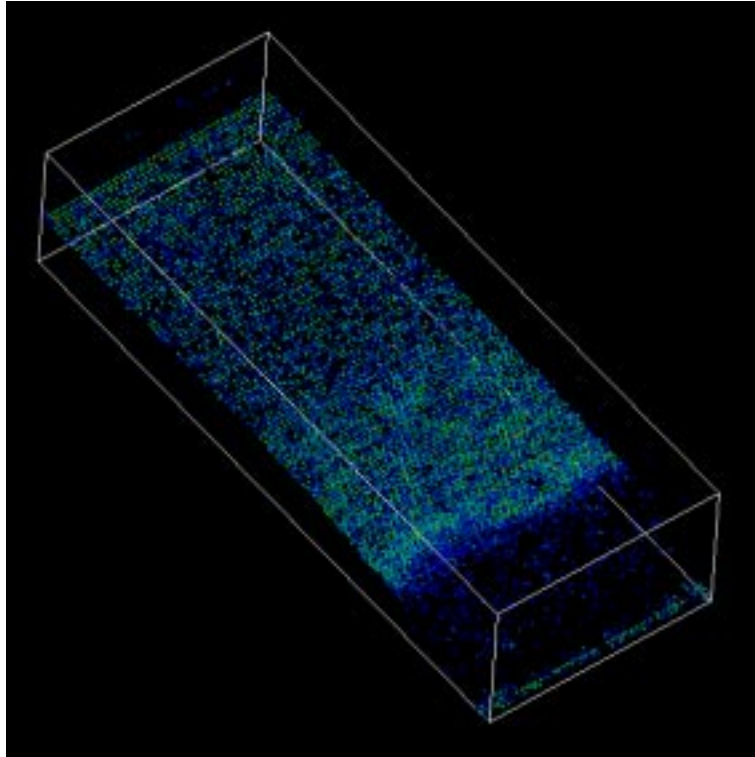


Numerische Simulation des mechanischen Verhaltens von Quasikristallen

Diplomarbeit von Gunther Schaaf



Hauptberichter: Prof. Dr. H.-R. Trebin
Mitberichter: Prof. Dr. H. Herrmann

Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart

Mai 1998

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Quasikristalle	9
1.1 Historisches	9
1.2 Einige experimentelle Eigenschaften	11
1.3 Strukturmodelle	12
1.3.1 Definitionen	12
1.4 Konstruktion von Quasigittern	14
1.4.1 Streifenprojektionsformalismus	14
1.4.2 Gridformalismus	17
1.4.3 Rationale Approximanten	19
1.5 Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling	20
1.6 Dekorationen des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings	24
1.6.1 Monoatomare Dekorationen	25
1.6.2 Diatomare Dekorationen: Von der TI-Dekoration zum binären ikosaedrischen Modell	25
2 Versetzungen und mechanisches Verhalten	29
2.1 Grundlagen	29
2.2 Versetzungen im Kontinuumsbild	33
2.3 Versetzungen in Kristallen	36
2.3.1 Besondere Punkte auf der Versetzungslinie	38
2.3.2 Partialversetzungen	39
2.3.3 Superversetzungen	40
2.3.4 Der generalisierte Stapelfehler und die Gamma-Oberfläche	42
2.3.5 Das Peierls-Nabarro-Modell einer Versetzung	43
2.4 Versetzungen in Quasikristallen	45
2.4.1 Kontinuumstheorie für Quasikristalle	46
2.4.2 Konstruktion von Versetzungen in Quasikristallen	46
2.4.3 Experimentelle Untersuchungen	48
2.4.4 Numerische Simulationen	49

3	Molekulardynamik und Visualisierung	53
3.1	Allgemeine Vorgehensweise	53
3.2	Integratoren	55
3.3	Kraftberechnung und Potentialmodell	56
3.4	Nachbarlisten und der Link-Cell-Algorithmus	58
3.5	Ränder	59
3.6	Durchführen einer Schersimulation	60
3.7	Detektion der Defektstruktur	62
4	Gamma-Oberflächen-Berechnungen	63
4.1	Vorgehensweise	63
4.2	Ergebnisse	64
4.3	Diskussion	69
5	Schersimulationen	71
5.1	Präparation	71
5.2	Inhomogene Scherung	75
5.3	Homogene Scherung	80
5.3.1	Allgemeine Bemerkungen	80
5.3.2	Analyse der Versetzungsbewegung	84
6	Zusammenfassung und Ausblick	89
A	Zur linearen Elastizitätstheorie	93
	Danksagung	103

Einleitung

Plastizität und Festigkeit sind charakteristische Merkmale fester Stoffe, die ihre Verwendbarkeit und ihren Einsatz in verschiedenen Anwendungsbereichen festlegen. Darüberhinaus entscheiden sie das Verhalten und die Belastbarkeit der aus ihnen konstruierten Objekte. Es obliegt der Festkörperphysik, die zugrundeliegenden Mechanismen aufzuklären, zu beschreiben und damit Anstöße zur Neu- und Weiterentwicklung von Herstellungs- und Bearbeitungsverfahren zu geben.

Nachdem durch die Röntgenbeugungsexperimente von LAUE ET AL. [23] der kristalline Aufbau der festen Materie nachgewiesen worden war, wurden verschiedene Modelle zur Erklärung des plastischen Verhaltens vorgeschlagen. FRENKEL [21] berechnete 1926 erstmals die Schubfestigkeit einfacher Kristalle. Seine Annahme eines starren Aneinanderabgleitens zweier Netzebenen führte ihn zu Werten, die um Größenordnungen zu hoch lagen. Es dauerte bis zum Jahr 1934, als OROWAN [38], POLANYI [42] und TAYLOR [47] unabhängig voneinander eine Erklärung fanden. Sie beschrieben das Abgleiten unter Zuhilfenahme eines linienförmigen Defektes, der Versetzung, und konnten unter dieser Annahme realistische Werte für die Schubfestigkeit angeben.

Die große Bedeutung von Versetzungen für die verschiedensten Eigenschaften fester Stoffe führte dazu, daß sich vor allem in den fünfziger Jahren eine enorme Anzahl von Wissenschaftlern deren Erforschung widmete. Es folgte eine Periode nachlassenden Interesses; die Theorie der Versetzungen galt als gut verstanden und schien keine prinzipiell neuen Erkenntnisse mehr bereitzuhalten.

Der verstärkte Einsatz von Computern in der Physik hat auch der Erforschung der kristallinen Defekte neue Möglichkeiten eröffnet. Die numerische Simulation eines physikalischen Vorgangs nimmt dabei eine Art Zwischenstellung zu den klassischen Bereichen der Physik — Theorie und Experiment — ein und läßt die einstmals scharfe Trennlinie zwischen beiden verschwimmen.

Während der Experimentator an realen Objekten Versuche vornimmt und dabei mit der ungeheuren Vielfalt von Effekten konfrontiert wird, beschäftigt sich der Theoretiker mit Modellen, die die experimentellen Ergebnisse möglichst gut erklären, und im Gegenzug neue Voraussagen treffen, die wiederum in weiteren Experimenten zu bestätigen sind.

Der numerischen Simulation gelingt es, die Vorteile von beiden Vorgehensweisen zu vereinigen. Während viele natürliche Vorgänge dem Experiment nicht — oder nur unter kaum zu bewältigenden Anstrengungen — zugänglich sind, kann durch geschickte Nachbildung im Rechner praktisch jeder solche Vorgang dargestellt werden. Gleichzeitig kann durch

einfache Variation von Parametern ein verwandtes Problem untersucht werden, für das im Experiment womöglich ein unter großem Aufwand veränderter Versuchsaufbau nötig wäre.

Im Gegensatz zur Theorie, die aufgrund des entstehenden Rechenaufwandes meist nur einfachste Modellsysteme behandeln kann, besteht die Beschränkung der numerischen Simulation allein in der Leistungsfähigkeit des verwendeten Rechners und Algorithmus.

Die Untersuchung von Versetzungen ist ein Gebiet, das mit am stärksten vom Einsatz von Computern profitiert hat. Bei ihrer Simulation wird typischerweise ein Kristall aus idealisierten Atomen zusammengesetzt, auf die ebenfalls idealisierte Kräfte wirken. So konnte für die verschiedenen Kristallstrukturen die Entstehung von Versetzungen, ihre Bewegung und gegenseitige Wechselwirkung simuliert werden. Die qualitativen Ergebnisse der Simulationen stehen zumeist in gutem Einklang mit den experimentellen Messungen, bei quantitativen Resultaten bestehen noch Defizite, die in erster Linie auf der unzureichenden Kenntnis der Natur und Form der atomaren Wechselwirkungen beruhen.

Es liegt nahe, dieses Werkzeug auf ein noch recht junges Teilgebiet der Physik anzuwenden: Die Physik der Quasikristalle. Auch bei dieser Stoffklasse wurden Versetzungen beobachtet und es gilt als sicher, daß sie großen Einfluß auf ihre plastische Verformung haben.

Quasikristalle, die erstmals 1984 von SHECHTMAN [45] entdeckt wurden, räumten mit einer alten Vorstellung der Festkörperphysik auf. Diese besagte, daß sämtliche in der Natur vorkommenden Kristalle einen — zumindest weitreichend — periodisch aufgebaut sein müßten. Daraus ergibt sich unmittelbar, daß sie nur zwei-, drei-, vier- oder sechszählige Rotationssymmetrie besitzen können. Das Beugungsbild von SHECHTMANS Probe zeigte jedoch fünfzählige Symmetrie bei scharfen Bragg-Reflexen, so daß von einer hochgeordneten Struktur mit kristallographisch verbotenen Symmetrien ausgegangen werden mußte. Später wurden sogar Stoffe mit acht-, zehn- und zwölfzähligen Symmetrien gefunden.

Für Quasikristalle mußte also die Annahme einer Translationssymmetrie fallengelassen werden. Da die meisten Erklärungen der Eigenschaften von Kristallen jedoch auf deren periodischer Struktur aufbauen, ergibt sich die für die Festkörperphysik die schwierige und reizvolle Aufgabe, diese Theorien auf die allgemeineren, in Quasikristallen verwirklichten Strukturen zu erweitern.

In dieser Arbeit wurden einfache Scherdeformationen an Quasikristallen, in die eine Versetzung eingebaut wurde, simuliert. Der Einbau erfolgte durch Aufprägen eines Verschiebungsfeldes nach dem PEIERLS-NABARRO-Modell. Die gewählte Simulationsmethode wird als Molekulardynamik bezeichnet. Darunter versteht man die simultane numerische Integration der Newtonschen Bewegungsgleichungen für jedes Atom zu diskreten, aufeinanderfolgenden Zeitpunkten.

Zur Bestimmung geeigneter Gleitebenen sowie günstiger Richtungen für den Einbau und das anschließende Scheren wurden Vorversuche durchgeführt. Dabei wurde die Probe entlang der zu untersuchenden Ebene aufgeschnitten und die beiden Hälften starr gegeneinander verschoben. Die potentielle Energie der entstandenen Konfiguration wurde berechnet und diente als Maß für die Eignung dieser Verschiebung für einen Versetzungseinbau.

Ein Problem dreidimensionaler Simulationen besteht in der Visualisierung der beobachteten Effekte. In dieser Arbeit wurde ein auf ZHOU [58] zurückgehendes Verfahren

verwendet, das die erhöhte potentielle Energie der an der Versetzung beteiligten Atome ausnutzt. Für die Anwendung auf Quasikristalle mußte dieses Verfahren erweitert werden.

Gliederung der Arbeit

Am Anfang dieser Arbeit steht ein Überblick des Gebietes der Quasikristalle. Zusätzlich wird die verwendete Struktur, das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling, und die verwendete Dekoration beschrieben.

Im nächsten Kapitel erfolgt ein kurzer Abriß der Theorie der Versetzungen und ihres Einflusses auf mechanische Eigenschaften. Insbesondere werden Versetzungen in Quasikristallen betrachtet.

Es schließt sich eine Darstellung des verwendeten Simulationsverfahren an, versehen mit einigen allgemeinen Bemerkungen zur Problematik von Simulationen an mechanischen Systemen.

Darauf folgen zwei Kapitel mit den Ergebnissen dieser Arbeit. Kapitel 4 beschreibt die Vorversuche der starren Verschiebung der Probenhälften, während Kapitel 5 die Schersimulationen und ihre Analyse zum Inhalt hat.

Kapitel 1

Quasikristalle

1.1 Historisches

„Ein Idealkristall baut sich durch die unendliche, regelmäßige Wiederholung identischer Struktureinheiten im dreidimensionalen Raum auf“ [10]. Diese oder eine ähnliche Feststellung findet sich in den meisten Lehrbüchern der Festkörperphysik. Man geht aus von einem Aufbau des Kristalles — genauer: des ihm zugrundeliegenden Kristallgitters — aus elementaren Struktureinheiten, den *Elementarzellen*. Dabei gilt, daß die Verschiebung einer Elementarzelle um eine ganzzahlige Linearkombination dreier bestimmter Vektoren, der *primitiven Translationen* des Gitters, diese auf eine zweite Elementarzelle abbildet. Dieser Sachverhalt wird auch als **Translationsperiodizität** bezeichnet. Eine solche Annahme wurde schon im 18. Jahrhundert aufgrund des regelmäßigen Aufbaus und der äußeren Form der Kristalle geäußert [24] und konnte 1912 von LAUE, FRIEDRICH und KNIPPING [23] durch die ersten Röntgenbeugungsexperimente bestätigt werden. Das Beugungsbild eines Kristalles zeigt scharfe Peaks; im Gegensatz dazu stehen amorphe Strukturen ohne weitreichende Translationsordnung. Ihr Beugungsbild besteht aus diffusen, konzentrischen Ringen.

Aus der Translationsperiodizität folgt unmittelbar, daß in periodischen Kristallen nur ein-, zwei-, drei-, vier- oder sechszählige Drehsymmetrieachsen auftreten können. Andere Drehsymmetrien werden als *kristallographisch verboten* bezeichnet. Ein entsprechender Satz für Parkettierungen der Ebene wurde schon 1619 von KEPLER bewiesen [29]. Doch auch ohne strenge mathematische Betrachtungen wird schnell klar, warum z.B. fünfzählige Drehsymmetrien nie auftreten können: Beim Versuch, eine Ebene mit Fünfecken zu parkettieren, müssen schon nach wenigen Aneinanderreihungen entweder Lücken gelassen werden, oder es treten Überlappungen auf. Dieser Sachverhalt wird als *Frustration* bezeichnet.

Vor diesem Hintergrund kann man sich die Verwunderung der physikalischen Fachwelt vorstellen, als im März 1982 SHECHTMAN ET AL. [45] eine Al-Schmelze mit 14 % Mangananteil schnell abschreckten und anschließend einer Röntgenstrukturanalyse unterzogen (Abb. 1.1). Sie stellten sechs fünfzählige, zehn dreizählige und 15 zweizählige Symmetrieachsen fest, was der Symmetriegruppe eines Ikosaeders entspricht und zu der Bezeichnung



Abbildung 1.1: Beugungsbild von i-AlMn in fünfzähliger Richtung (aus [45]).

i-AlMn für die neue Substanz führte. i-AlMn konnte also keine kristalline Struktur besitzen.¹ Eine amorphe Struktur schied jedoch aufgrund der scharfen Peaks im Beugungsbild ebenfalls aus. Die Lösung brachte die Rückbesinnung auf einige ältere mathematische Arbeiten, die von der physikalischen Fachwelt bis dahin als — in der Natur nicht realisierte — Spielereien angesehen worden waren: die **quasi-periodischen Strukturen**. Darunter versteht man nichttranslationsperiodische Strukturen mit diskretem Beugungsbild. Ein Beispiel stellt das eindimensionale Gitter gegeben durch die Funktion

$$f(x) = \cos 2\pi x + \sin 2\pi\alpha x, \quad \alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q} \quad (1.1)$$

dar. Sein Beugungsbild besteht aus zwei Linien an den Wellenzahlen 1 und α .

1974 hatte PENROSE [41] eine später nach ihm benannte ebene Parkettierung veröffentlicht (Abb. 1.3(a)), die aus **zwei** Bausteinen, einer dicken und einer dünnen Raute, zusammengesetzt werden kann. Auch hier liegt keine Translationsperiodizität vor, es läßt sich keine Elementarzelle angeben. Trotzdem besticht das Muster geradezu durch seine Regelmäßigkeit, z.B. kommen die auftretenden Linien nur in fünf verschiedenen Orientierungen vor, was als **Bindungs-Orientierungs-Ordnung** bezeichnet wird. Sein Beugungsbild besteht aus diskreten Bragg-Reflexen.

Ein Muster mit entsprechenden Eigenschaften zur Parkettierung des dreidimensionalen Raumes wurde 1982 von KRAMER [30] veröffentlicht. LEVINE und STEINHARDT [35] schlugen es als Modell für i-AlMn vor. Durch Belegung dieser — in Analogie zur Kristallphysik so bezeichneten — Quasigitter mit Atomen erhält man die seither so bezeichneten **quasi-periodischen Kristalle** oder kurz **Quasikristalle**. Das berechnete Beugungsbild stimmte hinsichtlich der Lage der Bragg-Peaks mit SHECHTMANS experimentellem Ergebnis nahezu völlig überein.

¹Eine Verzwilligung herkömmlicher Kristalle [39] konnte bald durch verschiedene elektronenmikroskopische Untersuchungen ausgeschlossen werden.

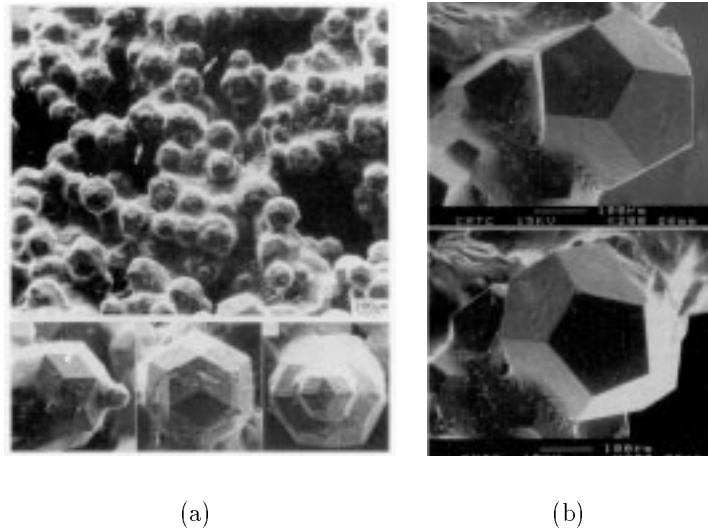


Abbildung 1.2: Elektronenmikroskopische Aufnahme von AlCuLi (a) (aus [17]) und AlCuFe (b) (aus [1]).

Dieses Kapitel hat zunächst die Herstellung von Quasikristallen zum Inhalt; anschließend werden einige ihrer Eigenschaften zusammengestellt. Daraufhin werden diverse Begriffe eingeführt und verschiedene Methoden zur Erzeugung von Quasigittern vorgestellt. Es schließt sich die Beschreibung des in der vorliegenden Arbeit verwendeten *binären ikosaedrischen Tilings* an.

1.2 Einige experimentelle Eigenschaften

SHECHTMANS i -AlMn erwies sich als thermodynamisch nicht stabil, sondern ging nach einstündigem Tempern bei 400°C in eine kristalline Phase über. Es wurde seither jedoch eine Vielzahl thermisch stabiler ikosaedrischer Phasen dargestellt, die erste 1986 von DUBOST ET AL. [17] mit $\text{Al}_6\text{Li}_3\text{Cu}$. Sie trat in Form von Einkristallen der Größenordnung 200 bis $300\ \mu\text{m}$ in triakontaedrischer Morphologie auf (Abb. 1.2(a)). Ein weiteres Beispiele ist $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$, das 1987 von TSAI ET AL. entdeckt wurde. Es trat in Einkristallen auf, die die Form eines Dodekaeders hatten (Abb. 1.2(b)).

Es wurden auch Quasikristalle mit — ebenfalls kristallographisch verbotenen — acht- und zehnzähligen Symmetrien gefunden. Sie bestehen aus zweidimensionalen quasikristallinen Schichten, die in der dritten Dimension periodisch angeordnet sind und werden seit ihrer Entdeckung durch BENDERSKY [4] als **T-Phasen** bezeichnet. Ein Vertreter ist dekaagonales AlCuCo. Schließlich kennt man **eindimensionale Quasikristalle**. Sie bestehen aus zweidimensionalen periodischen Kristallen deren Abfolge in der dritten Dimension quasiperiodisch ist. Ein Vertreter dieser Gruppe ist AlPd.

Die experimentelle Darstellung erfolgte anfangs mittels des **Schmelzspinnverfahrens**, bei dem die Schmelze auf schnellrotierende gekühlte Trommeln gespritzt wird. Auf diese Weise können Abkühlraten von bis zu 10^6 Kelvin pro Sekunde erreicht werden. Später gelang die Darstellung mittels gewöhnlicher Kristallzuchtverfahren wie dem Czochralski-Verfahren.

1992 stellte DE BOISSIEU Einkristalle mit Volumina im cm^3 -Bereich dar [7]. An ihnen können die gleichen mechanischen Experimente wie an periodischen Kristallen durchgeführt werden.

Experimentell ergaben sich u.a. folgende charakteristische Eigenschaften von Quasikristallen:

- Obwohl sie Legierungen normalleitender Metalle sind, ist die *elektrische Leitfähigkeit* von Quasikristallen schlecht und steigt mit zunehmender Temperatur und zunehmender Defektdichte.
- Der Elektronenbeitrag zur spezifischen Wärme ist sehr klein, was auf die niedrige Zustandsdichte an der Fermikante zurückzuführen ist.
- Quasikristalle sind sehr hart, wasserabweisend, wärmeisolierend und weisen eine hohe Korrosionsbeständigkeit auf. Der Reibungskoeffizient zwischen Kristall- und Quasikristalloberflächen ist extrem niedrig.
- Bestimmte Quasikristalle wie $i\text{-Ti}_{45}\text{Ni}_{17}\text{Zr}_{38}$ sind ausgesprochen gute Wasserstoffspeicher.

Mögliche technische Anwendungen von Quasikristallen ergeben sich vor allem aus den beiden letzten aufgeführten Punkten. So können sie für Beschichtungen verwendet² oder in Gleitlagern eingesetzt werden. Ihre Eignung als Wasserstoffspeicher ist Gegenstand aktueller Forschung [16].

Zu den hier nicht aufgeführten mechanischen Eigenschaften von Quasikristallen gibt Abschnitt 2.4.3 Auskunft.

1.3 Strukturmodelle

1.3.1 Definitionen

Der periodische Aufbau eines n -dimensionalen Kristalls zeigt sich auch im reziproken Raum: Das reziproke Gitter als Fouriertransformierte des Ortsraumes ist wiederum periodisch. Es läßt sich als ganzzahlige Linearkombination von n Basisvektoren \mathbf{k}_i darstellen

$$\mathbf{k}_{rez} = \sum_{i=1}^n n_i \mathbf{k}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, \dots, n \quad (1.2)$$

²Die Standardantwort auf die Frage nach industriellen Anwendungen bestand lange Zeit in der quasikristallinen Bratpfanne.

Die Anzahl d der Basisvektoren wird als **Rang** des Systems bezeichnet und ist für einen periodischen Kristall gleich der Raumdimension n . Eine quasiperiodische Struktur ergibt im reziproken Raum kein periodisches Gitter. Zur Darstellung der Bragg-Reflexe werden $d > n$ Basisvektoren. Dies führt zu folgenden Definitionen:

Definition 1 (quasiperiodisch) *Eine Struktur des n -dimensionalen Raumes heißt **quasiperiodisch**, wenn für ihren Rang d gilt: $d > n$.*

Definition 2 (Quasikristall) *Eine quasiperiodische Struktur mit nichtkristallographischen Symmetrien wird als **Quasikristall** bezeichnet.*

Quasiperiodische Strukturen mit kristallographisch erlaubten Symmetrien werden dagegen als **inkommensurabel** bezeichnet.

Periodische Kristalle werden konstruiert, indem ein abstraktes Gebilde — das *Kristallgitter* — an jedem Punkt mit derselben Anordnung von Atomen, der *Basis*, besetzt wird. Um aus quasiperiodischen Strukturen Atomkonfigurationen zu gewinnen, die in Einklang mit experimentell beobachteten Quasikristallen stehen, bietet sich ein Vorgehen wie in der Kristallphysik an.

Definition 3 (Tiling) *Ein **Tiling** ist eine vollständige Parkettierung des Raumes durch Aneinanderlegen einer endlichen Anzahl unterschiedlicher Objekte, der **Tiles**, die sich nicht überlappen. Ein gemeinsamer Eckpunkt von mehreren Tiles wird als **Vertex** bezeichnet.*

Definition 4 (Quasigitter) *Ein Tiling, dessen Vertizes mit δ -Distributionen besetzt werden, wird als **Quasigitter** bezeichnet.*

Den wohl bekanntesten Vertreter der Tilings, das **Penrosemuster**, zeigt Abb. 1.3(a). Es weist eine fünfzählige Drehsymmetrie in dem Sinne auf, daß die Verbindungslinien zweier Vertizes parallel zu nur fünf verschiedenen Richtungen auftreten, die in die Ecken einen Fünfecks zeigen. Man bezeichnet dies als **Bindungs-Orientierungs-Ordnung**.

Das Penrosemuster besteht aus zwei Tiles, einer dicken und einer dünnen Raute, wobei der spitze Winkel jeweils 72° bzw. 36° beträgt. Deren alleinige Angabe reicht zur Konstruktion noch nicht aus, vielmehr werden **Anpaßregeln** benötigt. Ein Beispiel zeigt Abb. 1.3: Rautenkanten dürfen nur dann aneinandergelegt werden, wenn sie dieselben Pfeile besitzen und diese in dieselbe Richtung zeigen. Dies ist ein Beispiel für eine **perfekte Anpaßregel**. Durch ihre Anwendung kann zwar ein Tiling erzeugt werden, diese Methode erweist sich jedoch als äußerst mühsam und ungünstig für eine numerische Implementation. Zu letzterer bedient man sich hauptsächlich der Projektionsmethoden, die in Abschnitt 1.4.1 vorgestellt werden.

Die Anpaßregeln liefern noch kein eindeutiges Tiling, es lassen sich unendlich viele konstruieren. Dies steht in krassem Gegensatz zur Situation in einem perfekten Kristallgitter, das schon durch die Angabe der Einheitszelle eindeutig festliegt. Die Tilings lassen sich in Äquivalenzklassen, die **Lokale-Isomorphie-Klassen**, kurz **LI-Klassen** einteilen. Zwei

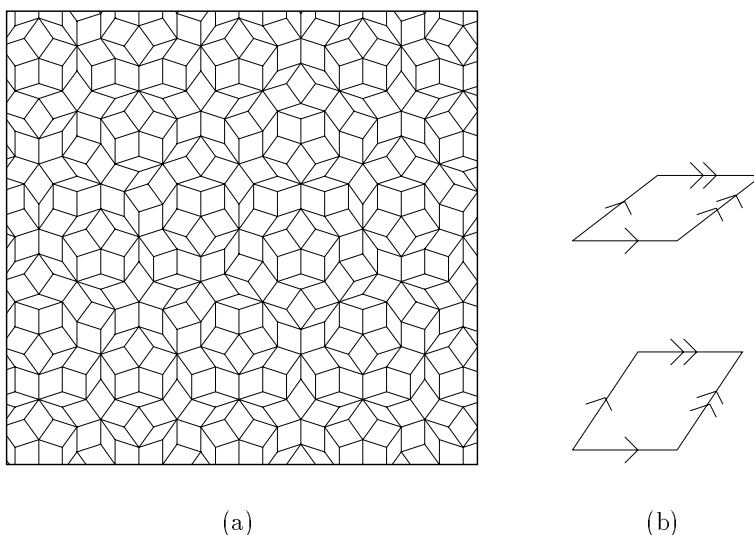


Abbildung 1.3: Penrosemuster und dazugehörige Tiles. Veranschaulicht sind die Anpaßregeln: nur Seiten mit entsprechenden Pfeilen dürfen aneinandergelegt werden.

Tilings werden als **lokal isomorph** bezeichnet, wenn jedes beliebige Teilmuster des einen Tilings im anderen ebenfalls vorkommt. Die beiden Tilings sind damit geometrisch ununterscheidbar, so sind z.B. ihre Beugungsbilder gleich. Sie sind jedoch nicht identisch, d.h. sie lassen sich nicht über ihre gesamte Ausdehnung zur Deckung bringen. Man macht sich leicht klar, daß die Eigenschaft der lokalen Isomorphie symmetrisch, reflexiv und transitiv ist.

1.4 Konstruktion von Quasigittern

Quasigitter weisen kristallographisch verbotene Symmetrien auf. Periodische Kristalle höherer Dimension besitzen jedoch diese Symmetrien. Durch Projektion dieser **Hypergitter** $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ (\mathbb{R}^d wird als Hyperraum bezeichnet) in den n -dimensionalen Ortsraum ist es möglich, Quasigitter zu erzeugen. In diesem Abschnitt werden der Streifenprojektionsformalismus und die Gridmethode erläutert. Eine hervorragende Zusammenfassung dieses Gebiets findet sich bei ZOGLAUER [48], dort werden auch sämtliche hier aufgestellten Behauptungen bewiesen.

1.4.1 Streifenprojektionsformalismus

Unter der Wirkung der ikosaedrischen Raumgruppe zerfällt der Hyperraum in zwei invariante Unterräume. Die Vertices des n -dimensionalen Quasikristalls werden durch die orthogonale Projektion π_{\parallel} des Hypergitters auf den n -dimensionalen Unterraum E^{\parallel} konstruiert.

Er wird als **physikalischer Raum** oder auch **Parallelraum** bezeichnet und hat mit dem einfach kubischen Hypergitter den Ursprung gemeinsam. Das orthogonale Komplement von E_{\parallel} nennt man den **Orthogonalraum** E_{\perp} , das direkte Produkt von physikalischem und Orthogonalraum liefert wiederum den Hyperraum

$$E_{\parallel} \oplus E_{\perp} = \mathbb{R}^n. \quad (1.3)$$

Der physikalische Raum schneidet das Hypergitter irrational, d.h. es gilt $E_{\parallel} \cap \mathbb{Z}^d = \{0\}$. Damit liegen die Vertizes allerdings dicht in E_{\parallel} . Eine Möglichkeit, eine diskrete Struktur zu erhalten besteht nun darin, nur die Hypergitterpunkte innerhalb einer beschränkten Teilmenge des Hyperraumes zu projizieren. Im Regelfall wird hierfür der **Auswahlstreifen** S verwendet. Diesen erhält man durch Verschieben des d -dimensionalen Einheitswürfels

$$W^d = \left\{ \sum_{i=1}^d \lambda_i \mathbf{e}_i : 0 < \lambda_i \leq 1 \right\} \quad (1.4)$$

entlang E_{\parallel} zu

$$S = \{ \mathbf{x} + \boldsymbol{\eta} : \mathbf{x} \in E_{\parallel} \wedge \boldsymbol{\eta} \in W^d \}. \quad (1.5)$$

Die Projektionsvorschrift zur Erzeugung des Quasigitters T läßt sich somit wie folgt schreiben:

$$T = \pi_{\parallel}(S \cap \mathbb{Z}^d). \quad (1.6)$$

Eine andere Darstellung verwendet die orthogonale Projektion π_{\perp} auf den Orthogonalraum E_{\perp} . Dann gilt

$$T = \pi_{\parallel}(\pi_{\perp}^{-1}(A) \cap \mathbb{Z}^d) \quad (1.7)$$

wobei $A = \pi_{\perp}(W^d)$, die Projektion des Einheitswürfels auf den Orthogonalraum, als **Akzeptanzbereich** bezeichnet wird.

Der Streifenprojektionsformalismus soll am Beispiel der eindimensionalen quasiperiodischen Kette veranschaulicht werden (Abb. 1.4), die sich aus der Projektion des zweidimensionalen Quadratgitters \mathbb{Z}^2 auf eine Gerade ergibt. Als physikalischer Raum E_{\parallel} fungiert eine Ursprungsgerade. Mittels der orthogonalen Projektion π_{\parallel} bildet man sämtliche Punkte des \mathbb{Z}^2 auf E_{\parallel} ab. Im Fall einer rationalen Steigung von E_{\parallel} erhält man eine diskrete, periodische Punktfolge, im Fall einer irrationalen Steigung eine dichte Punktmenge. Mit Hilfe des Einheitsquadrates W^2 und des Auswahlstreifens S kann wie oben beschrieben, eine diskrete, *quasiperiodische Abfolge* von langen (L) und kurzen (K) Intervallen, die die Tiles der quasiperiodischen Kette darstellen, erzeugt werden. Die Punkte auf E_{\parallel} bilden die Vertizes.

Wählt man τ^{-1} , den reziproken goldenen Schnitt, als irrationale Steigung von E_{\parallel} ³, so bilden die Intervalle eine Fibonacci-Folge.⁴

³Als goldenen Schnitt $\tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ bezeichnet man die Lösung der Verhältnisgleichung $\frac{x}{1-x} = \frac{1-x}{1}$

⁴Diese Variante der Fibonacci-Folge entsteht durch Anwendung der Bildungsregeln $L \rightarrow LK$ und $K \rightarrow L$ auf das Ausgangselement K . Sie ist äquivalent zur bekannten Darstellung $F(0) = 0$, $F(1) = 1$, $F(n) = F(n-1) + F(n-2)$ für $n > 1$.

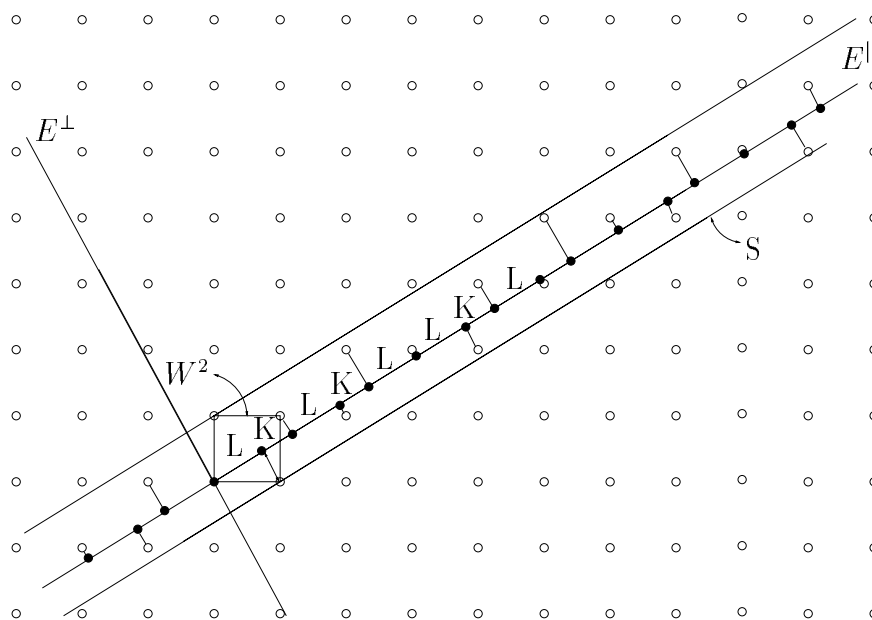


Abbildung 1.4: Streifenprojektionsformalismus

Die Projektion der Basisvektoren des Quadratgitters ergibt die (hier kollinearen) Basisvektoren des Tilings. Jeder Vertex kann in dieser Basis als 2-Tupel ganzer Zahlen dargestellt werden. Allgemein ergibt sich bei einer Projektion aus einem d -dimensionalen Hypergitter ein d -Tupel für jeden Vertex. d entspricht dem in Abschnitt 1.3.1 eingeführten Rang der quasiperiodischen Struktur.

Der physikalische Raum kann bei vorgegebener Steigung im Hypergitter um \mathbf{r} verschoben werden. Diese Translation kann in Anteile aus dem physikalischen und dem Orthogonalraum zerlegt werden:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\parallel} + \mathbf{r}_{\perp}, \quad \mathbf{r}_{\parallel} \in E_{\parallel}, \quad \mathbf{r}_{\perp} \in E_{\perp}. \quad (1.8)$$

Translationen \mathbf{r}_{\parallel} bewirken einfach eine Verschiebung des Tilings im physikalischen Raum. Quasigitter, die sich lediglich um eine solche Verschiebung unterscheiden, heißen **äquivalent**. Genauso sind im physikalischen Raum Verzerrungen möglich, durch deren langwellige Anregung können Phononen erzeugt werden. Translationen \mathbf{r}_{\perp} im Orthogonalraum hingegen haben einen bemerkenswerten Effekt.

Betrachtet man einen Gitterpunkt, der bei einer solchen Operation den Auswahlstreifen verläßt. Dann tritt genau ein anderer Gitterpunkt auf der anderen Seite in den Streifen ein. Dies bewirkt stets eine Vertauschung der Intervallabfolge LK zu KL oder umgekehrt. Eine solche lokale Veränderung der Tilingabfolge wird als **Flip** bezeichnet; die beiden beteiligten Quasigitter sind lokal isomorph. Diese Verschiebung bzw. die zugehörige Verzerrung bedeuten einen zusätzlichen Freiheitsgrad, der als **phasonisch** bezeichnet wird. Langwellige Anregungen dieses Freiheitsgrades haben die Erzeugung von **Phasonen** zur Folge. Diese äußern sich im Auftreten der oben beschriebenen Flips. Abb. 1.5 zeigt einen solchen Flip

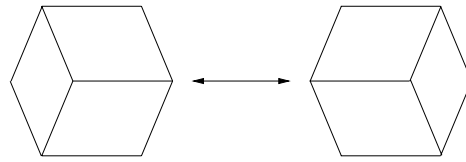


Abbildung 1.5: Flip im Penrosemuster: die abgebildeten Konfigurationen bestehen aus zwei dicken und einer dünnen Raute. Der innere Vertex flippt.

für das Penrosemuster. Flips bewirken eine Umordnung der Tilingbausteine, und es treten Vertexkonfigurationen auf, die im idealen Tiling verboten sind. Der Name Phason wurde von SOCOLAR, LUBENSKY und STEINHARDT [46] eingeführt und stammt aus einer Fourierentwicklung der freien Energie eines Quasikristalls nach Dichtewellen. Diese zeigt sich als invariant gegenüber Phasenverschiebungen, was im Streifenprojektionsformalismus gerade der Verschiebung des Auswahlstreifens im Orthogonalraum entspricht. Im Experiment äußert sich ein nichtkonstantes phasonisches Feld in einer Verschiebung der Bragg-Reflexe.

Das Penrose-Muster läßt sich mittels eines Streifenprojektionsformalismus erzeugen, dabei kann die Projektion aus einem fünfdimensionalen einfach kubischen Hypergitter erfolgen⁵, in das eine Ebene mit irrationaler Steigung eingebettet wird. Der Orthogonalraum ist dreidimensional und besitzt die Gestalt eines rhombischen Ikosaeders.

1.4.2 Gridformalismus

Der von DE BRUIN [11] erstmals vorgestellte Gridformalismus ist eine — im Vergleich zum Streifenprojektionsformalismus — weniger anschauliche Methode zur Konstruktion von Quasigittern. Für eine numerische Implementierung ist er jedoch günstiger: seine Laufzeit ist von der Ordnung $O(N)$ in der Teilchenzahl N , während sich für den Streifenprojektionsformalismus eine Abhängigkeit der Ordnung $O(N^{d-n+1})$ ergibt. Dabei bezeichnet d die Dimension des verwendeten Hypergitters und n die des physikalischen Raumes. Der Gridformalismus in der in dieser Arbeit benutzten Form ist äquivalent zum Streifenprojektionsformalismus.

Das Hypergitter \mathbb{Z}^d besteht aus d $(d-1)$ -dimensionalen parallelen, äquidistanten Hyperebenscharen, die den n -dimensionalen physikalischen Raum in d ebenfalls n -dimensionalen Hyperebenen, den **Grids** schneiden. Ihre Gesamtheit wird als **d-Grid** bezeichnet und durch die Hyperebenengleichungen

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{g}_i \rangle - \gamma_i = k_i, \quad i = 1, \dots, d, \quad k_i \in \mathbb{Z}, \quad \gamma_i \in \mathbb{R} \quad (1.9)$$

beschrieben. Die \mathbf{g}_i werden als **Gridvektoren** bezeichnet und fungieren als Basisvektoren des Quasigitters, die k_i bezeichnet man als **Scharparameter**. γ_i ist jeweils der Abstand des Ursprungs zu der ihm nächsten Gridgeraden in Richtung des Gridvektors \mathbf{g}_i .

⁵ein n -dimensionaler Kubus besitzt eine n -zählige Drehachse.

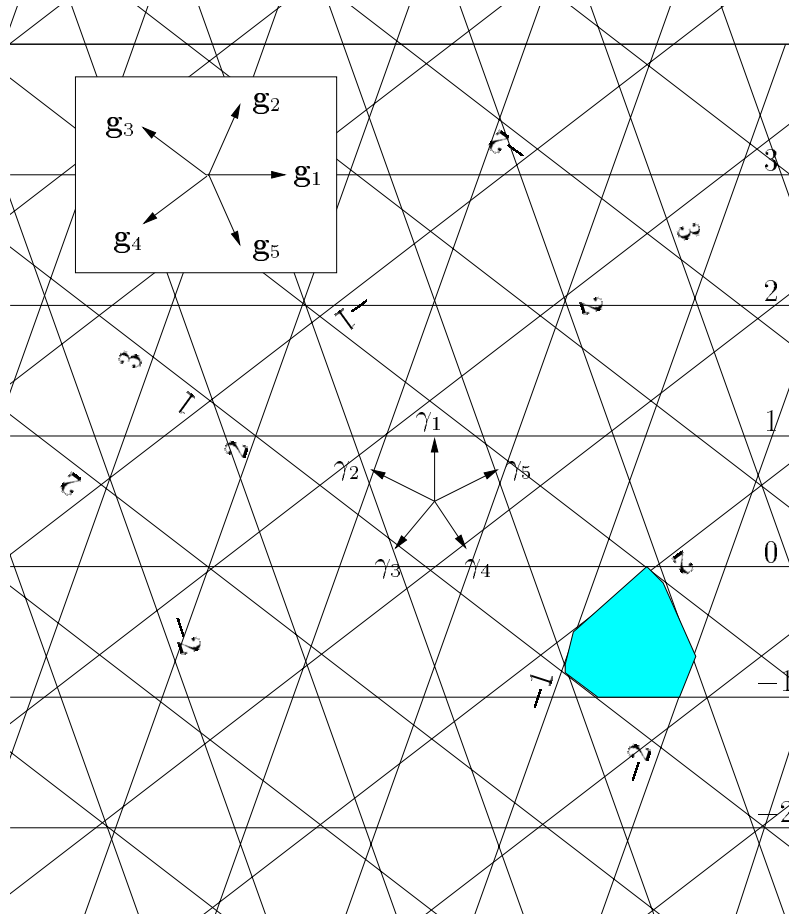


Abbildung 1.6: Zur Gridmethode. Das Polygon $(0, -1, 1, 3, 2)$ ist hervorgehoben.

Der physikalische Raum wird durch das d -Grid in verschiedene Polytope zerlegt. Jedes Polytop befindet sich für jede Gridvektorrichtung zwischen zwei parallelen Gridhyperebenen mit aufeinanderfolgenden k_i . In jeder Richtung wählt man das größere k_i und erhält somit ein d -Tupel von Scharparametern, welches das zugehörige Polytop eindeutig indiziert. Es gilt somit

$$k_i = [\langle \mathbf{x}_p, \mathbf{g}_i \rangle - \gamma_i] \quad (1.10)$$

mit der Gaußklammer $[\]$, die jeder reellen Zahl die nächstgrößere ganze Zahl zuordnet. Die **Dualisierung**

$$\mathbf{x}_T = \sum_{i=1}^d k_i \mathbf{g}_i \quad (1.11)$$

ordnet jedem Polytop genau einen Punkt des Quasigitters zu.

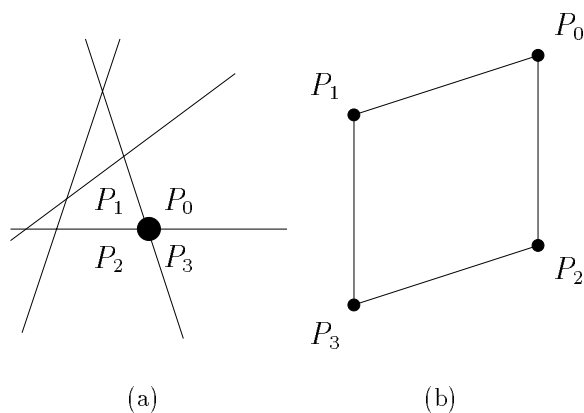


Abbildung 1.7: Dualisierungsschritt: jedem Schnittpunkt zweier Gridgeraden wird ein Polytop zugeordnet, hier am Beispiel der dicken Raute.

In Abb. 1.6 wird die Gridmethode für ein Penrosemuster erläutert. Die Projektion der Einheitsvektoren des \mathbb{R}^5 ergibt den Fünfstern \mathbf{g}_i , aus den sich wiederum die fünf Grids ergeben. Als Beispiel ist das Polygon $(0, -1, 1, 3, 2)$ hervorgehoben. Betrachtet man den Schnittpunkt zweier Gridgeraden (Abb. 1.7(a)), so erkennt man, daß er stets⁶ von vier Polygonen umgeben ist, deren Koordinatentupel sich in genau einer Koordinate um ± 1 unterscheiden, sofern sie eine gemeinsame Kante besitzen. Für die beteiligten Gridgeraden ergeben sich 10 Kombinationsmöglichkeiten, dabei nehmen sie in jeweils fünf Fällen einen Winkel von 36° oder von 72° ein. Durch den Dualisierungsschritt (Abb. 1.7(b)) können also zwei verschiedene Rauten in je fünf Orientierungen entstehen.

1.4.3 Rationale Approximanten

Die mittels des Streifenprojektionsformalismus und der Gridmethode erzeugten Quasigitter sind unendlich ausgedehnt. Für die praktische Verwendung, z.B. in einer Simulation können jedoch nur endlich ausgedehnte Konfigurationen verwendet werden. Außerdem bietet es sich öfter an, die Probe an ihren Rändern periodisch fortzusetzen, um Oberflächeneffekte zu eliminieren. Dies ist bei Simulationen an periodischen Kristallen ohne weiteres möglich, bei Quasikristallen scheint dieser Weg aufgrund der fehlenden Translationsperiodizität nicht gangbar.

Einen Ausweg bietet die Verwendung von rationalen Approximanten. Dies sind periodische Gitter, deren Einheitszelle aus einem — möglichst großen — Ausschnitt des unendlich ausgedehnten Quasigitters besteht. Ihre Konstruktion erfolgt im Streifenprojektionsformalismus durch Verkippen des physikalischen Raumes, so daß dieser das Hypergitter rational schneidet. Damit wird die Abfolge der Tiles periodisch. An den Grenzflächen des Approximanten können phasonische Defekte entstehen.

⁶Eine Ausnahme bilden die **singulären Punkte**, an denen sich mehr als zwei Gridgeraden schneiden. Sie lassen sich durch geeignete Wahl der γ_i jedoch vermeiden.

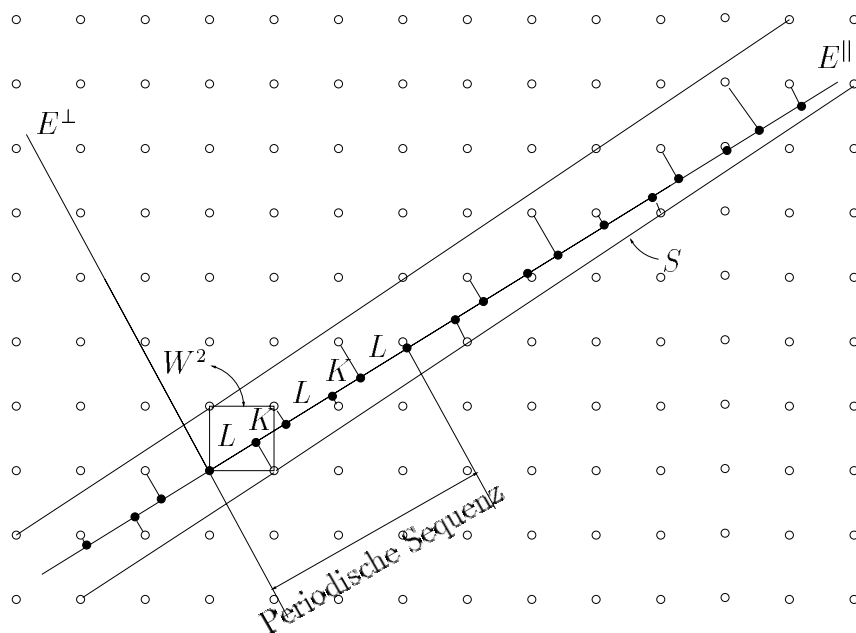


Abbildung 1.8: Zur Konstruktion rationaler Approximanten: Streifenprojektionsformalismus mit rationaler Steigung des Auswahlstreifens.

Zur Veranschaulichung dient wiederum das eindimensionale Beispiel aus Abschnitt 1.4.1. Einen Approximanten der quasiperiodischen Kette erhält man durch rationale Approximation des goldenen Schnittes τ durch den Quotienten zweier aufeinanderfolgender Fibonacci-Zahlen

$$\tau_n = \frac{p_{n+1}}{p_n} \quad (1.12)$$

Er wird als $\frac{p_{n+1}}{p_n}$ -Approximant bezeichnet. In Abb. 1.8 wurde auf diese Weise ein $\frac{3}{2}$ -Approximant erzeugt. Die Abfolge der langen und kurzen Intervalle wird periodisch, als periodische Sequenz erhält man $LK L K L$ mit der Periodenlänge von $3d_L + 2d_K$, wobei d_K und d_L die jeweiligen Streckenlängen sind.

1.5 Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling

Auf dem **ikosaedrischen Ammann-Kramer-Penrose-Tiling** (auch **dreidimensionales Penrose-Tiling**) basiert das in dieser Arbeit verwendete Strukturmodell. Es wurde 1982 von KRAMER [30] vorgestellt und von LEVINE und STEINHARDT als Modell für SHECHTMANS i- AlMn -Phase vorgeschlagen [34]. Weitere Untersuchungen wurden von KATZ und DUNEAU [28], HENLEY [25] sowie ELSER [18] durchgeführt. Letzterer berechnete sein Beugungsbild und stellte hinsichtlich der Lage der Peaks weitgehende Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis für i- AlMn fest.

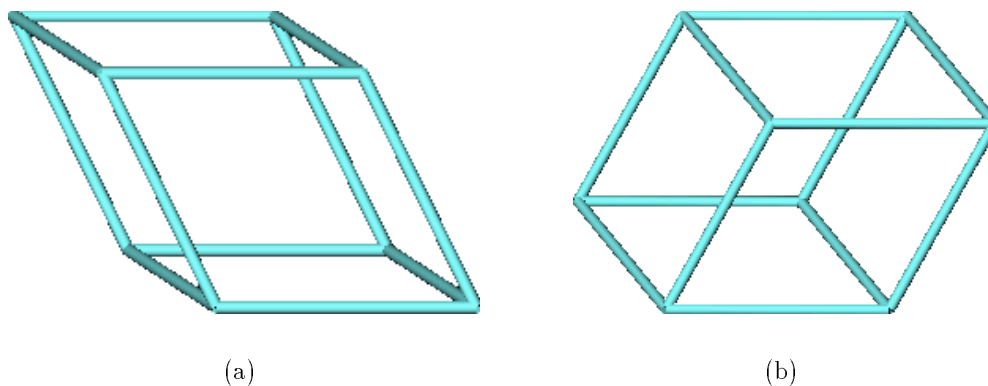


Abbildung 1.9: Prolates (a) und oblates (b) Rhomboeder.

Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling kann mittels eines Streifenprojektionsformalismus aus dem sechsdimensionalen kubischen Hypergitter \mathbb{Z}^6 konstruiert werden. Der physikalische Raum und der Orthogonalraum sind beide dreidimensional. Dabei ist der Akzeptanzbereich ein *rhombisches Triakontaeder*, ein von 30 Rauten begrenzter Körper. Es ist die Projektion des sechsdimensionalen Einheitswürfels in den Orthogonalraum. Bei der Erzeugung mittels der Gridmethode erhält man die Gridvektoren als Projektion der sechs Einheitsvektoren des Hypergitters zu

$$\left\{ \begin{pmatrix} c_0 \\ s_0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_2 \\ s_2 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_4 \\ s_4 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_6 \\ s_6 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_8 \\ s_8 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{4}{5}} \end{pmatrix} \right\}, \quad (1.13)$$

wobei $c_k = \cos \frac{2k\pi}{5}$, $s_k = \sin \frac{2k\pi}{5}$.

Sie zeigen in die Eckpunkte eines Ikosaeders. Ihre Länge beträgt $\sqrt{\frac{4}{5}}$. In einer entlang der zweizähligen Achsen des Ikosaeders zeigenden Basis lauten die Gridvektoren

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \tau \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ \tau \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (1.14)$$

mit der Länge $\sqrt{2 + \tau}$.

Als Tiles fungieren ein **prolates** und ein **oblates Rhomboeder** (Abb. 1.9), die von jeweils drei Gridvektoren aufgespannt werden und in jeweils zehn verschiedenen Orientierungen vorkommen können. Beim prolates Rhomboeder nehmen die \mathbf{g}_i einen Winkel von $63,43^\circ$ ein, beim oblates $116,57^\circ$. Indem in den Gridvektoren nach (1.14) τ durch τ_n ersetzt wird, lassen sich rationale Approximanten des 3D-Penrose-Tilings gewinnen. Dies ist besonders einfach für die zweizähligen Richtungen durchführbar: in den Paaren, deren

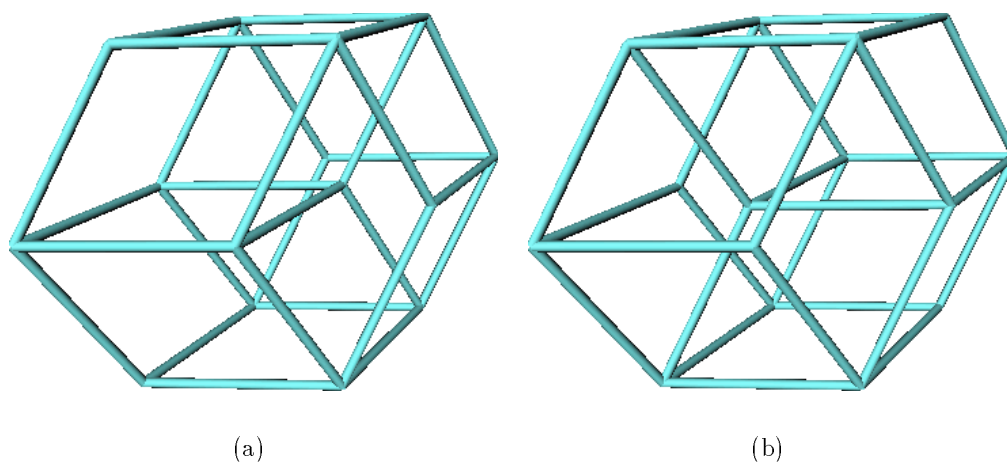


Abbildung 1.10: Rhombisches Dodekaeder. Die Konfigurationen unterscheiden sich dadurch, daß der innere Vertex geflippt ist.

Summe eine dieser Richtungen ergibt, kann die Approximation separat durchgeführt werden, so daß sich ein quaderförmiger Approximant mit drei verschiedenen Periodenlängen p ergibt. Für diese gilt nach ROTH [43]:

$$p = \frac{2}{\sqrt{2 + \tau}} (\tau p_{n+1} + p_n). \quad (1.15)$$

Für $n \rightarrow \infty$ und damit $\tau_n \rightarrow \tau$ divergiert p , womit man den idealen Quasikristall als Grenzfall eines Approximanten mit unendlicher Periodenlänge gewinnt.

Aus je zwei prolaten und oblaten Rhomboedern gewinnt man das rhombische Dodekaeder (Abb. 1.10), das für das Verständnis der Struktur eine wesentliche Rolle spielt. So beobachtet man an ihm die oben beschriebenen Flips. Abb. 1.10(a) und 1.10(b) unterscheiden sich dadurch, daß der innere Vertex, an den alle vier beteiligten Rhomboeder grenzen, seine Position geändert hat. Des weiteren taucht es in den Vorschriften für verschiedene Dekorationen auf.

In den Tilings findet man zweidimensionale Strukturen, die den Ebenenstrukturen periodischer Kristallen entsprechen. Dies ist nicht unmittelbar einsichtig, da ja keine Translationsperiodizität vorliegt. Tatsächlich lassen sich die **Schichten** identifizieren, die aus aneinandergrenzenden Tiles bestehen, wobei sämtliche solche Grenzflächen zueinander parallel sind. Eine Schicht ist in dem Sinne eine zweidimensionale Struktur, daß sie in zwei Raumrichtungen unendlich ausgedehnt ist, während sie in der dritten nur eine geringe Ausdehnung von etwas mehr als einer Rhomboederkante besitzt.

In Abb. 1.11(a) wird dieser Sachverhalt für den zweidimensionalen Fall am Beispiel des Penroseusters veranschaulicht. Dort findet man als eindimensionales Analogon zu den Schichten die **Bänder**, von denen eines hervorgehoben ist. Es stellt ein Analogon zu einer Linie in einem zweidimensionalen periodischen Gitter dar. Seine Ausdehnung in

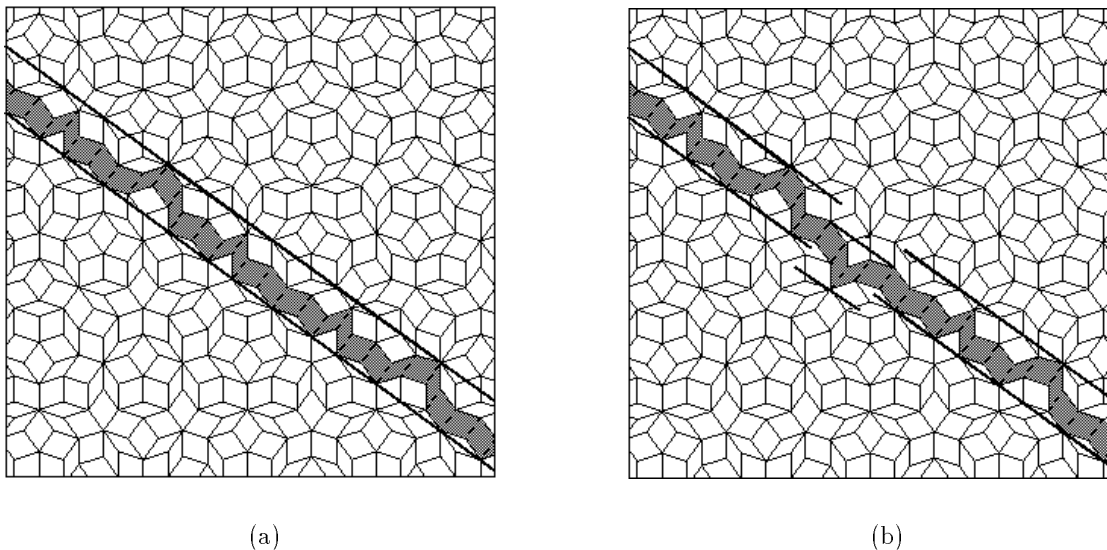


Abbildung 1.11: Bänder in zweidimensionalen Quasikristallen mit Einhüllenden. Im rechten Bild ist die Alternation Condition verletzt.

„Bandrichtung“ ist unendlich groß, während es in die dazu senkrechte Richtung durch die beiden eingezeichneten **Einhüllenden**⁷ begrenzt ist.

Nach der Herausnahme eines kompletten Bandes passen die beiden übrigbleibenden Quasikristallhälften exakt aufeinander, allerdings entstehen Vertexkonfigurationen, die in einem perfekten Tiling nicht vorkommen. Ein weiteres Merkmal eines perfekten Tilings ist die **Alternation Condition**: nach dem Auftreten einer bestimmten Raute einer Sorte muß die nächste der gleichen Sorte entgegengesetzt orientiert sein. Im Gridformalismus entspricht ein Band einer Gridlinie, d.h. seine Vertices entstehen durch die Dualisierung jener Polytope auf beiden Seiten dieser Gridlinie. Das Auftreten von Flips äußert sich in einer Verletzung der Alternation Condition (Abb. 1.11(b)). Die Einhüllende weist eine Diskontinuität auf.

In Abb. 1.11(a) erkennt man, daß sämtliche Vertices auf Scharen paralleler Linien liegen (z.B. den eingezeichneten Einhüllenden). Offensichtlich liegt wie in periodischen Kristallen eine **Linienstruktur** vor. Ein Unterschied zu diesen besteht darin, daß diese Linien nicht äquidistant sind; es kommt eine endliche Anzahl unterschiedlicher Abstände vor.

Alle diese Aussagen gelten analog für die Schichten in dreidimensionalen Tilings, z.B. dem Ammann-Kramer-Penrose-Tiling. Die auftretenden Vertices lassen sich zu Scharen paralleler Ebenen in einer begrenzten Anzahl von Abständen zusammenfassen; diese sind für Ebenenscharen normal zu einer Drehsymmetrieachse am größten. Ihre Berechnung wur-

⁷Das sind die beiden Geraden minimalen Abstandes, zwischen denen sich alle an dem Band beteiligten Vertices befinden.

Richtung	Abstand	Häufigkeit	mittlerer Abstand
senkrecht zweizählig	0,201	0,19	0,36
	0,325	0,50	
	0,526	0,31	
senkrecht dreizählig	0,188	0,73	0,23
	0,232	0,13	
	0,419	0,14	
senkrecht fünzfählig	0,106	0,41	0,28
	0,341	0,28	
	0,447	0,31	

Tabelle 1.1: Ebenenabstände im Ammann-Kramer-Penrose-Tiling.

de von KUPKE [31] und RÜDINGER [44] durchgeführt, die Ergebnisse sind in Tabelle 1.1 zusammengefaßt. Hierbei und im folgenden wird eine Ebenenschar normal zu einer n -zähligen Drehachse kurz als n -zählige Ebenenschar bezeichnet. Die zwei-, drei- und fünfzähligen Ebenenscharen besitzen jeweils nur drei verschiedene Abstände.

Die Ebenenstrukturen spielen u.a. eine Rolle bei Channeling-Experimenten. Dabei werden Ionen in einer bestimmten Richtung auf einen Quasi- oder periodischen Kristall gestrahlt und ihre Eindringtiefe gemessen. Diese ist besonders hoch, wenn die Einstrahlung parallel zu einer Netzebene des Kristalls (einer Schicht des Quasikristalls) erfolgt. Rechnungen Experimentelle Ergebnisse finden sich bei ZEGER [56]. Für die Berechnung von Versetzungsstrukturen sind die Ebenenstrukturen ebenfalls von Bedeutung, da die Ebenenabstände in die Versetzungskernenergie eingehen. Das Gleiten von Versetzungen findet bevorzugt zwischen Ebenen mit großem Abstand statt. Wie aus Tabelle 1.1 ersichtlich wird, treten diese senkrecht zur zweizähligen Symmetrierichtung auf.

1.6 Dekorationen des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings

In dieser Arbeit wird das **binäre ikosaedrische Modell**, eine Dekoration des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings verwendet. Es stellt eine Weiterentwicklung der **TI-Dekoration** dar. Beide wurden 1986 von HENLEY und ELSER [26] vorgestellt.

Beide Dekorationen verwenden zwei Atomsorten. Dies ist insofern konsequent, als im Experiment noch nie ein monoatomarer Quasikristall beobachtet wurde, sondern sämtliche erstellten Proben zumindest binäre, meist sogar ternäre Legierungen waren. Auch in Computersimulationen mit zentralsymmetrischen Paarpotentialen vom Lennard-Jones-Typ bereiten monoatomare Dekorationen hinsichtlich ihrer Stabilität Probleme.

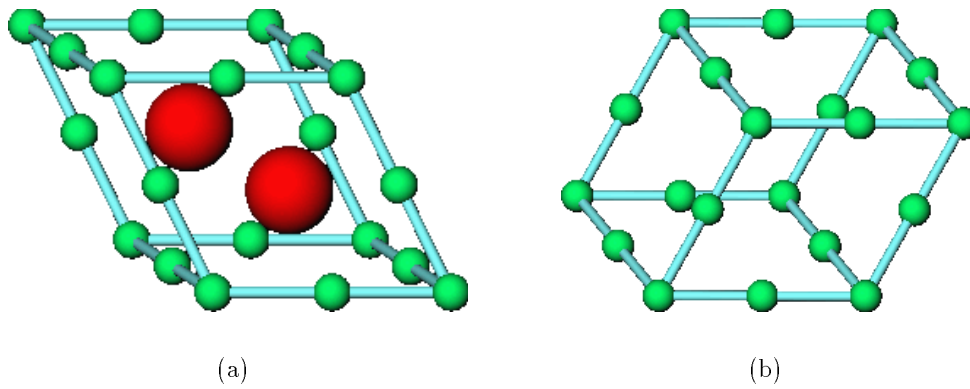


Abbildung 1.12: Prolates (a) und oblates (b) Rhomboeder bei der TI-Dekoration.

1.6.1 Monoatomare Dekorationen

Die einfachste vorstellbare Dekoration stellt die **primitive monoatomare Dekoration** dar. Bei ihr wird auf jeden Vertex ein Atom gesetzt. Bezogen auf eine Rhomboederkante als Einheitslänge tritt als Atomabstand ein Wert von 1,025 mit einer Koordinationszahl von 12,5 auf. Die Dekoration ist für jede Wahl des Radius, für den das Potential minimal wird, instabil. Ursache sind die Atome, die an den Enden der kurzen Diagonale des oblaten Rhomboeders platziert sind. Sie haben einen Abstand von 0,563 und erfahren eine stark repulsive Kraft. Eine Verkleinerung des Potentialradius kommt aufgrund der geringen Koordinationszahl von 0,76 nicht in Frage.

Durch eine einfache Modifikation erhält man die **us-Dekoration** (us steht für unit-sphere) die auf HENLEY [25] zurückgeht. Er stellte fest, daß die Bindungslängen von 0,563 in Ketten bzw. Ringen von je zehn Atomen auftreten. Durch Elimination jedes zweiten Atoms aus den Ringen bzw. der Atome von den Mittelpunkten der Rhombododekaeder erhält man eine große Stabilität bei weiterhin hoher Atomdichte. ROTH [43] wies die thermische Stabilität durch Relaxationsrechnungen an einer „verrauschten“ Konfiguration nach.⁸

DILGER [15] unternahm Schersimulationen an der us-Dekoration und zeigte ihre Instabilität gegenüber mechanischer Deformation. Seine Probe wurde zunächst amorph und wandelte sich bei fortgesetzter Scherung in einen fcc-Kristall um.

1.6.2 Diatomare Dekorationen: Von der TI-Dekoration zum binären ikosaedriscen Modell

Eine ebenfalls auf HENLEY [26] zurückgehende diatomare Dekoration stellt die **TI-Dekoration** dar. Bei ihr werden die Ecken und die Kantenmitten beider Rhomboeder mit Atomen der Sorte A dekoriert. Damit ist das oblate Rhomboeder ausgefüllt, beim prola-

⁸Dazu wurden die Atome aus ihrer ursprünglichen Position um 7 % ausgelenkt.

Richtung	Abstand	Häufigkeit	mittlerer Abstand
senkrecht zweizählig	0,124	0,30	0,24
	0,200	0,51	
	0,324	0,03	
	0,526	0,13	
	0,650	0,04	
senkrecht dreizählig	0,044	0,43	0,11
	0,144	0,30	
	0,188	0,27	
senkrecht fünzfählig	0,106	0,68	0,15
	0,131	0,07	
	0,236	0,15	
	0,341	0,10	

Tabelle 1.2: Ebenenabstände im binären ikosaedrischen Modell.

ten Rhomboeder verbleiben noch Lücken. Daher werden auf seine lange Raumdiagonale zusätzlich zwei Atome der Sorte B plaziert, so daß diese im Verhältnis $1 : \tau : 1$ geteilt wird (veranschaulicht in Abb. 1.12(a)). Die TI-Dekoration ist gegenüber einer Verrauschung von bis zu 25 % stabil.

Den Übergang von der TI-Dekoration zum **binären ikosaedrischen Modell** veranschaulicht man wiederum am rhombischen Dodekaeder in Abb. 1.13(a). Das Atom am zentralen Vertex wird entfernt und seine vier Nachbaratome der Sorte A so zu ihm hin verschoben, daß sie die Kante, auf der sie liegen, im Verhältnis $1 : \tau$ teilen. Die B-Atome und die verschobenen A-Atome bilden eine hexagonale Bipyramide (Abb. 1.13(b)).

Anschließend werden die vier verschobenen Atome in solche der Sorte B umgewandelt (Abb. 1.13(d)). Die entstandene Dekoration kann als Strukturmodell für $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$ angesehen werden [25]. Dabei stellen die A-Atome die Aluminium- bzw. Zinkatome dar, die B-Atome repräsentieren die Magnesiumatome.

Von AUDIER [2] stammt der Vorschlag, nur die beiden A-Atome auf den Kantenmitten des oblaten Rhomboeders zu verschieben und umzuwandeln (Abb. 1.13(c)). Die beiden A-Atome, die auf den Spitzen der hexagonalen Bipyramide liegen, bleiben unverändert. Damit erhält man ein Strukturmodell für $i\text{-Al}_6\text{CuLi}_3$, wobei die B-Atome mit den Lithiumatomen identifiziert werden. Die A-Atome stellen je nach Position auf Vertex oder Kantenmitte Aluminium- oder Kupferatome dar.

Eine Berechnung der auftretenden Abstände und Ebenenbelegungsdichten ist in Tabelle 1.2 dargestellt (nach [15]). Weiterhin treten die größten Abstände senkrecht zur zweizähligen Richtung auf, es gibt nun senkrecht zur zwei- und zur fünfzähligen Richtung mehr als drei verschiedene Abstände.

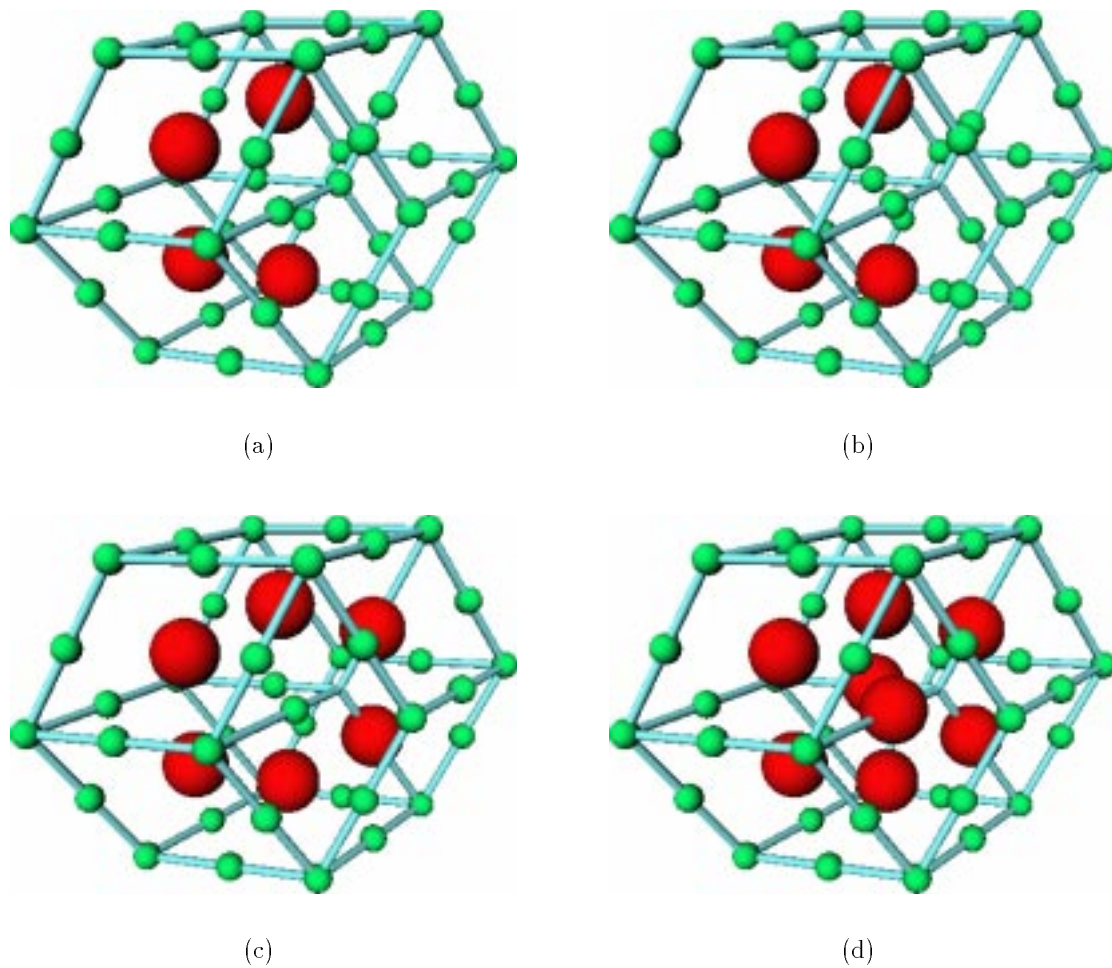


Abbildung 1.13: Übergang zum binären ikosaedrischen Modell: Im Rhombododekaeder bei der TI-Dekoration (a) werden nach Entfernung des inneren Vertex seine vier nächsten Nachbarn zu ihm hin verschoben (b). Die beiden Nachbarn, die auf der Kante des oblaten Rhomboeders sitzen, werden in Atome der Sorte B umgewandelt (c). Werden alle Nachbarn umgewandelt (d), so erhält man die modifizierte TI-Dekoration nach Henley.

Kapitel 2

Versetzungen und mechanisches Verhalten von Kristallen und Quasikristallen

2.1 Grundlagen

Ein Dehnungsexperiment an einem Kristall wird durch Anlegen einer äußeren Spannung σ und Messen der auftretenden Verzerrung ϵ durchgeführt. Bei der Auftragung von σ über ϵ ergibt sich ein Diagramm, wie es idealisiert in Abb. 2.1 dargestellt ist. Man bezeichnet es als **Spannungs-Dehnungs-Beziehung**. Es können drei Bereiche unterschieden werden:

- elastischer Bereich ($\epsilon < \epsilon_1$): Die äußere Spannung ist proportional zur Verzerrung. Bei ihrer Wegnahme kehrt der Kristall in seinen Ausgangszustand zurück.
- Bereich der plastischen Verformung ($\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2$): Die Spannungen wachsen mit fortschreitender Dehnung nicht weiter an. Die Deformation ist irreversibel, bleibt also nach Wegnahme der Spannung bestehen.
- Verfestigungsbereich ($\epsilon > \epsilon_2$): Die äußere Spannung steigt sehr stark an. Bei $\epsilon = \epsilon_3$ versagt das Material spröde, d.h. es bricht auseinander. Bei bestimmten polykristallinen Legierungen bleibt die Verfestigung aus, ein Effekt, der als **Superplastizität** bezeichnet wird.

Eine charakteristische Eigenschaft von Kristallen ist ihre plastische (d.h. permanente und irreversible) Verformung unter Einwirkung äußerer Spannungen. FRENKEL [21] erklärte ihr Zustandekommen über das starre Abgleiten einer Kristallhälfte relativ zur anderen entlang ihrer gemeinsamen Ebene, der **Gleitebene**. Er begründete dies mit der Beobachtung, daß beim Verformungsprozeß an den Seitenflächen des Kristalls Stufen entstehen.

Ein solcher **elementarer Gleitprozeß** ist in Abb. 2.2 veranschaulicht: Die beiden Kristallhälften gleiten in der Ebene SS' über eine Distanz von einer Gitterkonstanten aneinander ab. Im allgemeinen finden Gleitprozesse zwar über mehrere Gitterkonstanten statt,

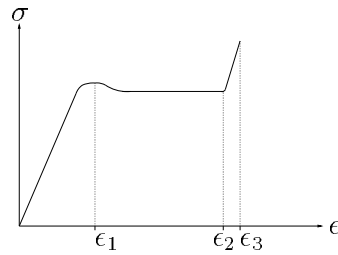


Abbildung 2.1: Ideale Spannungs-Dehnungs-Beziehung eines Kristalls.

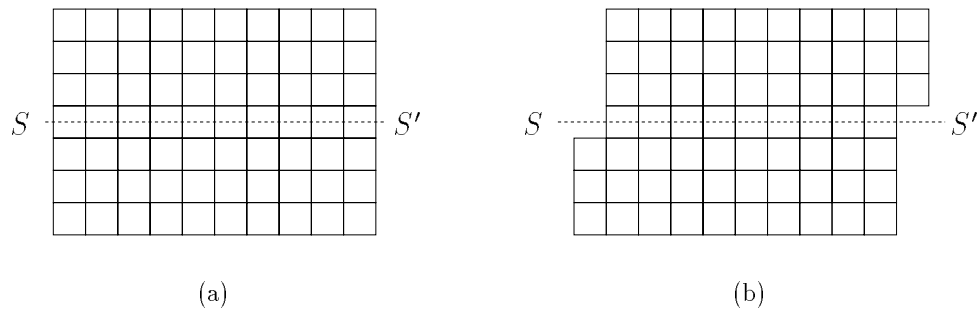
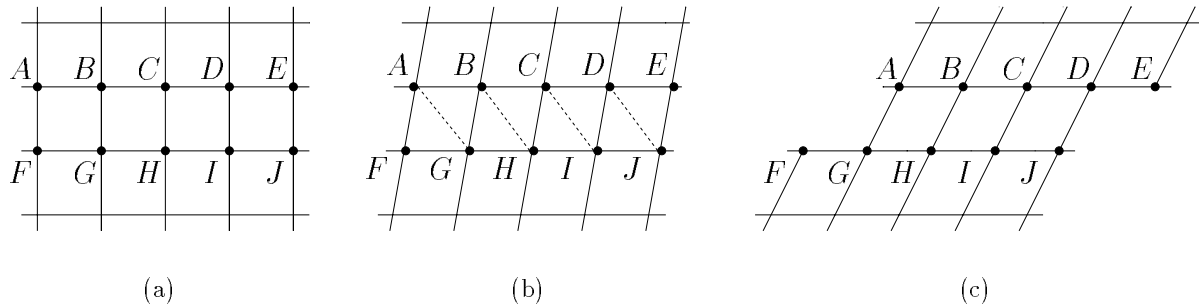
Abbildung 2.2: Elementarer Gleitprozeß: starres Abgleiten zweier Kristallhälften entlang der Gleitebene SS' .

Abbildung 2.3: Veranschaulichung des starren Abgleitens: Bei einem kritischen Scherwinkel brechen die Bindungen zwischen Atomen der unteren und der oberen Reihe auf; neue werden eingegangen.

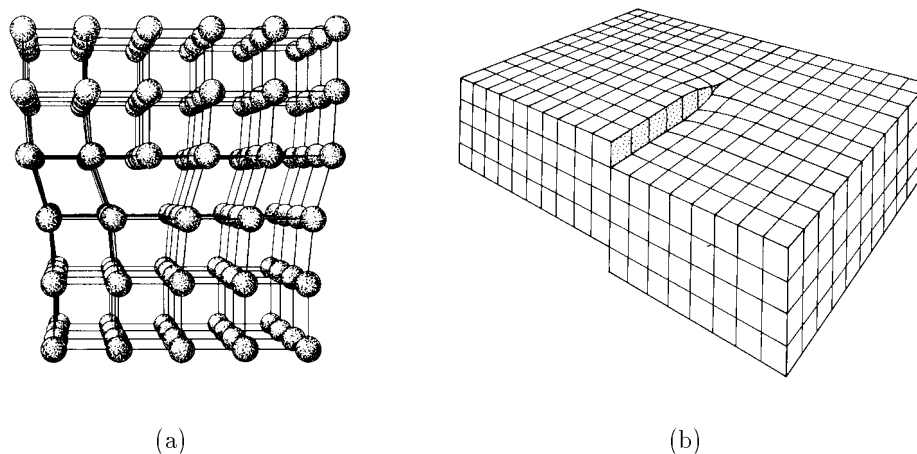


Abbildung 2.4: Stufen- (a) und Schraubenversetzung (b).

solche Mehrfachgleitprozesse können jedoch als Hintereinanderausführung von elementaren Gleitprozessen beschrieben werden.

Wie geht dieser elementare Gleitprozeß vonstatten? Im einfachsten Fall nimmt man ein gleichzeitiges Abgleiten aller Atome über die gesamte Gleitebene hinweg an, wie es in Abb. 2.3 dargestellt ist. Die Deformation von Abb. 2.3(a) nach Abb. 2.3(b) ist rein elastisch, d.h. sie verschwindet nach Wegnahme der äußeren Spannung. Bei fortgesetzter Deformation wird eine kritische Stelle erreicht; es befindet sich dann z.B. Atom B näher an Atom H als an Atom G . Die Bindung von B nach G bricht auf und es wird eine neue von B nach H eingegangen (Abb. 2.3(c)).

Jedoch liefert dieses Modell falsche Voraussagen für die kritische Spannung, ab der die plastische Deformation einsetzt. Aus der Bedingung $|BG| = |BH|$ erhält man für einen einfach kubischen Kristall einen kritischen Scherwinkel von $\arctan \frac{1}{2} \approx 26.5^\circ$. Die Anwendung des Hookeschen Gesetzes ergibt damit eine kritische Spannung von $\frac{\mu}{2}$, wobei μ der Schermodul des Kristalls ist. Durch die Annahme eines sinusförmigen Kraftgesetzes konnte FRENKEL [21] diesen Wert auf $\frac{\mu}{2\pi}$ senken; atomistische Rechnungen mit Paarpotentialen lieferten sogar $\frac{\mu}{30}$. Dieses Ergebnis steht allerdings noch immer in eklatantem Gegensatz zu den gemessenen Werten von 10^{-3} bis $10^{-4}\mu$.

Unabhängig voneinander führten 1934 OROWAN [38], POLANYI [42] und TAYLOR [47] einen Liniendefekt, die Stufenversetzung, ein (Abb. 2.4(a))¹. Sie beschrieben den elementaren Gleitprozeß als die Bewegung einer Stufenversetzung über die Gleitebene. Abb. 2.5(a) zeigt eine Momentaufnahme dieses Vorgangs: Auf dem Teil der Gleitebene zwischen S und A ist die obere Kristallhälfte bereits um eine Gitterkonstante abgeglitten, auf dem restlichen Teil zwischen S' und A noch nicht, so daß bei S eine Stufe entstanden ist. Dies hat eine überschüssige Halbebene AA' von Atomen zur Folge.

¹Die Schraubenversetzung (Abb. 2.4(b)) wurde erstmals im Jahre 1939 von BURGERS beschrieben [9].

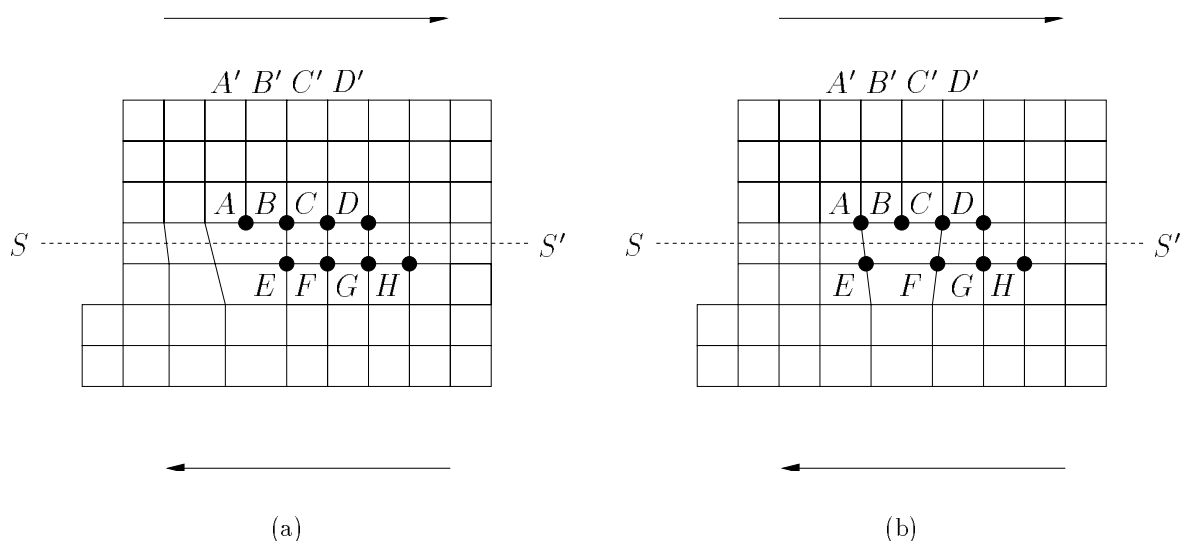


Abbildung 2.5: Gleitprozeß durch Bewegung einer Stufenversetzung über die Gleitebene.

Abb. 2.5(b) zeigt den nächsten Zwischenzustand: die zusätzliche Halbebene befindet sich jetzt zwischen den Punkten B und B' . Sie wird über die Positionen CC' und DD' weiter durch den Kristall wandern, bis auf der rechten Seite ebenfalls eine Stufe entstanden ist und derselbe Endzustand wie bei FRENKELS Beschreibung erreicht wird.

Rein qualitativ ist sofort klar, daß für die Bewegung einer Stufenversetzung eine geringere kritische Spannung als für das starre Abgleiten einer Kristallhälfte nötig ist: In Abb. 2.5(b) ist die Differenz der Atomabstände $|FB|$ und $|FC|$ viel kleiner als in Abb. 2.3(b), so daß schon eine geringe äußere Spannung zum Umklappen der Bindung des Atoms F von C nach B ausreicht.

Damit können die einzelnen Bereiche der Spannungs-Dehnungs-Beziehung aus Abb. 2.1 erklärt werden. Der elastische Bereich bei kleinen Dehnungen bewirkt geringe Auslenkungen der Atome aus ihrer Gleichgewichtslage, in die sie nach Wegnahme der äußeren Spannung zurückkehren. Beim Übergang in das plastische Fließen entstehen leicht bewegliche Versetzungen, für noch größere Dehnungen ist daher keine weitere Spannungserhöhung nötig. Die bei sehr großen Dehnungen auftretende Verfestigung entsteht durch die gegenseitige Behinderung der mittlerweile sehr zahlreich gewordenen Versetzungen.

Nachdem nun eine Motivation für die Beschäftigung mit Versetzungen gegeben wurde, soll in den nächsten Abschnitten ein kurzer Abriss der Theorie der Versetzungen erfolgen. Zuerst werden Versetzungen in einem isotropen Kontinuum betrachtet, dann wird der Einfluß einer periodischen Kristallstruktur untersucht. Dabei wird eine Methode zur Bestimmung der in einer vorgegebenen Struktur auftretenden Versetzungen vorgestellt, sowie ein einfaches Modell einer Versetzung entwickelt. Schließlich wird das Verhalten von Versetzungen in Quasikristallen untersucht.

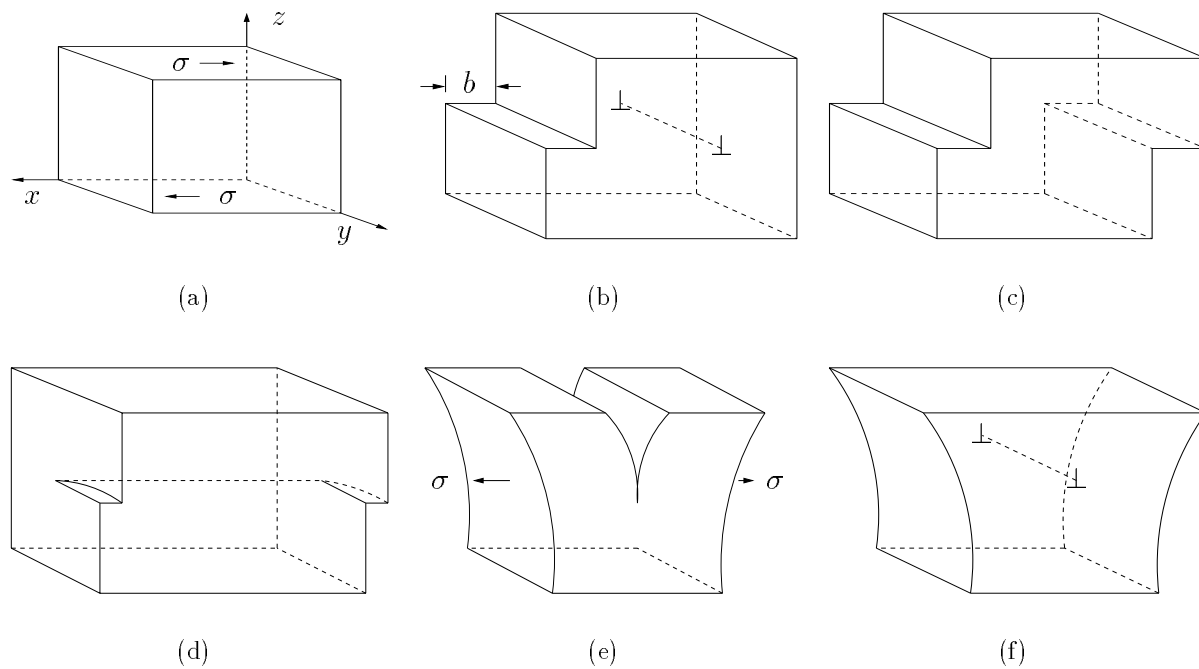


Abbildung 2.6: Zur Erzeugung von Versetzungen im Kontinuumsbild: In einem Würfel aus unverzerrtem Material (a) wird durch Scherung eine Stufenversetzung erzeugt (b); bei fortgesetzter Scherung verläßt sie den Würfel unter Ausbildung einer Stufe (c). Analog wird in (d) eine Schraubenversetzung konstruiert. In (e) und (f) ist der Volterra-Prozeß veranschaulicht.

2.2 Versetzungen im Kontinuumsbild

Im homogenen, isotropen, elastischen Kontinuum kann man sich das Zustandekommen von Versetzungen wie folgt erklären: Der Würfel aus unverzerrtem Material aus Abb. 2.6(a) wird entlang einer Halbebene normal zur z -Richtung eingeschnitten. Die **Stufenversetzung** in Abb. 2.6(b) entsteht, indem die obere Hälfte des Würfels um den Vektor $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$ in x -Richtung eingedrückt wird. Sie wird gekennzeichnet durch das Symbol \perp .

Die Versetzung ist der Rand der Schnitthalbene, der die Grenze zwischen unverschobenem und verschobenem Material bildet, hier also eine gerade Linie. Diese Betrachtung gilt allerdings nur im Kontinuumsbild, in Kristallstrukturen muß einer Versetzung stets eine gewisse Ausdehnung zugewiesen werden. In jedem Fall wird diese Linie als **Versetzungslinie** ξ bezeichnet. Den Vektor \mathbf{b} bezeichnet man als **Burgersvektor**. Eine Versetzung ist durch die Angabe von \mathbf{b} und ξ eindeutig bestimmt.

Schneidet man entlang der Halbebene in Abb. 2.6(d) ein und verschiebt wie dort gezeigt, so erhält man eine **Schraubenversetzung**. Für sie gilt, daß ihr Burgersvektor \mathbf{b} und ihre Versetzungslinie ξ parallel zueinander sind, während für eine Stufenversetzung $\mathbf{b} \perp \xi$ gilt. Eine Versetzung die sowohl eine Stufen- als auch eine Schraubenkomponente aufweist,

wird als **gemischte Versetzung** bezeichnet. Diese Konstruktionsmethode ist eng mit der Gleitbewegung einer Versetzung wie in Abb. 2.5 beschrieben, verknüpft; Durch Einschneiden mit darauffolgender Verschiebung um einen größeren Betrag erhält man denselben Effekt.

In Abb. 2.6(e) und Abb. 2.6(f) ist eine andere Konstruktionsmethode, der **Volterra-prozeß**, dargestellt. Der Würfel wird entlang der dargestellten Halbebene aufgeschnitten und einer der beiden entstehenden Blöcke vom anderen weg verschoben. Der entstehende Leerraum wird mit unverzerrtem Material aufgefüllt. Genauso wäre es möglich, diesen Block zum anderen hin zu verschieben, wonach die Blöcke sich durchdringen. In diesem Fall wird das überschüssige Material entfernt. Wegen der Freiheit in der Wahl des Referenzblockes ist der Burgersvektor \mathbf{b} zunächst nicht eindeutig. Weist man der Versetzungslinie $\boldsymbol{\xi}$ jedoch eine Richtung zu, so wird durch die Forderung, daß \mathbf{b} und $\boldsymbol{\xi}$ ein Rechtssystem bilden müssen, das Vorzeichen von \mathbf{b} eindeutig festgelegt.

Auch dieser Konstruktionsmethode läßt sich eine Bewegungsmöglichkeit der Versetzung zuordnen. Wird entlang einer tieferen Halbebene eingeschnitten und entsprechend mehr Material eingefügt, so kann dies als Bewegung der Versetzung normal zur Gleitebene (genauer: nach unten von ihr weg) interpretiert werden. Diese Bewegung wird als **Klettern** bezeichnet. Im Unterschied zur Gleitbewegung ist sie *nichtkonservativ bezüglich des Volumens*, das lokal nicht erhalten bleibt. Die Gleitbewegung hingegen stellt eine bezüglich des Volumens konservative Bewegung dar.

Versetzungen lassen sich als Schließfehler des Verschiebungsfeldes \mathbf{u} interpretieren: es gilt

$$\mathbf{b} = \oint_C d\mathbf{u} = \oint_C \boldsymbol{\beta} dx, \quad (2.1)$$

wobei C eine beliebige, geschlossene Kurve ist, die die Versetzungslinie umschließt. Die Distorsion $\boldsymbol{\beta}$ läßt sich nicht als Gradient eines Verschiebungsfeldes darstellen, da sonst gälte

$$\oint_C d\mathbf{u} = \oint_C \text{grad } \mathbf{u} dx \stackrel{\text{Stokes}}{=} \iint_S \text{rot grad } \mathbf{u} d\mathbf{S} = 0 \quad \text{mit } C = \partial S. \quad (2.2)$$

Umgekehrt gilt, daß nur versetzungsfreie Konfigurationen durch ein globales Verschiebungsfeld beschrieben werden können. Man definiert die **Burgersvektordichte** $\boldsymbol{\alpha} = \text{rot } \boldsymbol{\beta}$, die aufgrund von

$$\mathbf{b} = \oint_C \boldsymbol{\beta} dx \stackrel{\text{Stokes}}{=} \iint_S \text{rot } \boldsymbol{\beta} d\mathbf{S} = \iint_S \boldsymbol{\alpha} d\mathbf{S} \quad (2.3)$$

als Flächendichte von Versetzungen interpretiert werden kann.

Aus diesen Betrachtungen ergeben sich folgende elementare Eigenschaften von Versetzungen:

- Enthält das Material n Versetzungen mit Burgersvektoren \mathbf{b}_i , so ergibt sich bei einem Umlauf, der alle Versetzungslinien umfaßt, als gesamter Burgersvektor $\mathbf{b} = \sum_i \mathbf{b}_i$.

- In jedem Volumenelement des Raumes, das von Versetzungslinien durchkreuzt wird, gilt ein dem *Kirchhoffschen Gesetz* für elektrische Ströme entsprechender Zusammenhang: Der Fluß der Burgersvektoren durch die Oberfläche ist null. Versetzungslinien können sich verzweigen: eine Versetzung mit Burgersvektor \mathbf{b}_1 spaltet auf in zwei mit Burgersvektoren \mathbf{b}_2 und \mathbf{b}_3 , wobei

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 \quad (2.4)$$

gilt (Erhaltung des gesamten Burgersvektors). Insbesondere gilt, daß Versetzungslinien niemals an einem Punkt im Materialinneren enden. Sie sind entweder geschlossene Kurven oder enden an einer Oberfläche.

- Der Burgersvektor ist keine zeitliche Erhaltungsgröße. Es sind Versetzungsreaktionen möglich, insbesondere die Vereinigung zweier Versetzungen oder die Aufspaltung einer Versetzung in zwei. Stets gilt eine Gleichung (2.4) entsprechende Beziehung.

Im Kontinuumsbild läßt sich für eine unendlich lange, gerade Versetzung mit Hilfe der linearen Elastizitätstheorie ein Ausdruck für das Spannungsfeld herleiten. Betrachtet man eine solche Stufenversetzung mit Versetzungslinie $\boldsymbol{\xi}$ parallel zur z -Achse und Burgersvektor $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$ so erhält man für die Komponenten des Spannungstensors

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta}{r} \quad (2.5)$$

$$\sigma_{r\theta} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos\theta}{r} \quad (2.6)$$

$$\sigma_{zz} = -\frac{\mu b\nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta \cos\theta}{r} \quad (2.7)$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{\theta z} = 0 \quad (2.8)$$

Das Spannungsfeld fällt wie $1/r$ ab. Für eine Schraubenversetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_z$ ergibt sich

$$\sigma_{\theta z} = -\frac{\mu b}{2\pi r} \quad (2.9)$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = \sigma_{rz} = \sigma_{r\theta} = 0. \quad (2.10)$$

Die elastische Energie pro Längeneinheit $\frac{W}{L}$ berechnet sich durch Integration des Ausdrucks $\sigma d\epsilon$, wobei ϵ die Verzerrung angibt. Aufgrund des $1/r$ -Abfalls des Spannungsfeldes kann die Integration nur zwischen einem inneren Radius r_0 und einem äußeren Radius R durchgeführt werden. Es ergibt sich

$$\frac{W_e}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0} \quad (2.11)$$

wobei $K = 1$ für eine Stufenversetzung und $K = 1 - \nu$ für eine Schraubenversetzung zu setzen ist. Der Ausdruck divergiert für $r_0 \rightarrow 0$ oder $R \rightarrow \infty$.

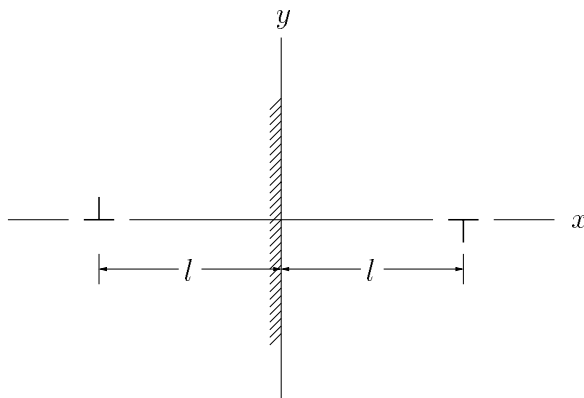


Abbildung 2.7: Spiegelversetzung.

Der innere Abschneideradius r_0 , läßt sich als Grenze des Gültigkeitsbereiches der linearen Elastizitätstheorie auffassen. In den meisten Kristallen beträgt er ungefähr zwei Gitterkonstanten. Der die Versetzungslinie umschließende Zylinder vom Radius r_0 wird als **Versetzungskern** bezeichnet. Seine potentielle Energie kann für verschiedene kristalline Materialien durch atomistische Rechnungen bestimmt werden. Für NaCl ergibt sich ein Wert von $\sim 0.2\mu b^2$.

Die Existenz eines äußeren Abschneideradius R zeigt, daß es nicht möglich ist, einer Versetzung eine finite Energie zuzuweisen. Sinnvolle Werte für R sind in einem realen Kristall der halbe durchschnittliche Abstand zur nächsten Versetzung; enthält er nur eine Versetzung, so wählt man den Abstand zur nächsten freien Oberfläche. Die gesamte auf eine Versetzung wirkende Spannung setzt sich aus den Selbstspannungen (Gleichung (2.8), Gleichung (2.10)), den äußeren und inneren Spannungen (letztere z.B. aufgrund weiterer Defekte im Material) sowie den Bildspannungen zusammen. Letztere entstehen aus der Abhängigkeit der Versetzungsenergie vom Abstand zu einer freien Oberfläche. Betrachtet man hierzu Abb. 2.7 mit der in z -Richtung geraden, unendlich ausgedehnten Stufenversetzung am Punkt $(-l, 0)$. Sie besitzt eine Spiegelversetzung am Punkt $(l, 0)$ mit paralleler Versetzungslinie und Burgersvektor mit umgekehrtem Vorzeichen. Für die (xx) -Komponente des Spannungstensors gilt

$$\sigma_{xx} = -\frac{2\mu b l x y}{\pi(1-\nu)r^6}(3(l-x)^2 - y^2) \quad (2.12)$$

was zu einer abstoßenden Kraft zwischen der Versetzung und der Spiegelversetzung führt.

2.3 Versetzungen in Kristallen

In einem Kristallgitter kann der Burgersvektor \mathbf{b} nicht mehr beliebige Werte annehmen. Meistens entspricht er einer Gittertranslation² und kann mit Hilfe eines auf FRANK [20]

²Eine Ausnahme stellen die im nächsten Abschnitt diskutierten Partialversetzungen dar.

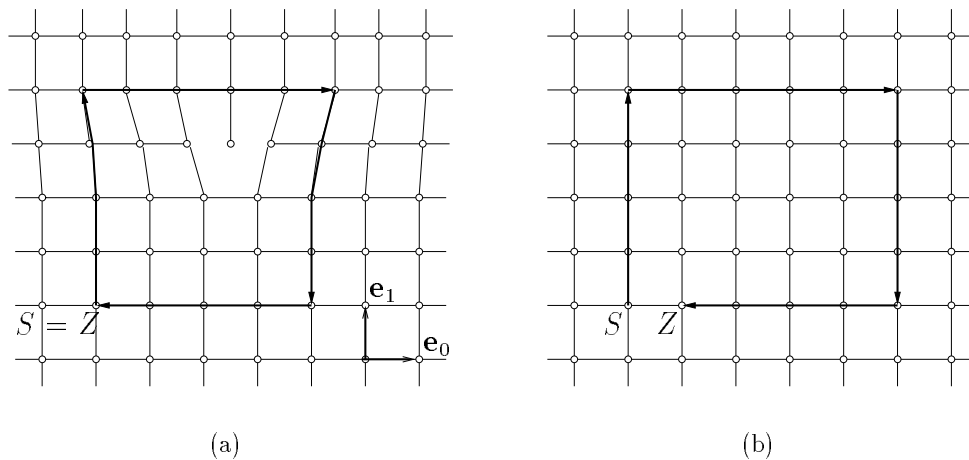


Abbildung 2.8: Zur Definition des Burgersvektors: Burgersumläufe in einem einfach kubischen Gitter mit (a) und ohne (b) Stufenversetzung.

zurückgehenden Verfahrens bestimmt werden. Dies soll an einem einfach kubischen Gitter mit einer Stufenversetzung (Abb. 2.8(b)) erläutert werden. Der Kristall ist in der Nähe der Versetzungslinie stark verzerrt, wogegen in weiter entfernten Bereichen nur geringe Verzerrungen auftreten. Ein Umlauf um die Versetzung ist angegeben; er verläuft innerhalb der schwach verzerrten Region von S nach $Z = S$. Abb. 2.8(a) zeigt den perfekten *Referenzkristall*; dort ist derselbe Umlauf angegeben, der jetzt nicht mehr geschlossen ist. Um ihn zu schließen, d.h. um vom Punkt Z nach S zu gelangen, muß ein Vektor $\mathbf{b} = -\mathbf{e}_0$ angefügt werden, der **wahre Burgersvektor**.

Oft ist es einfacher, umgekehrt vorzugehen, d.h. den *geschlossenen* Umlauf im Referenzkristall durchzuführen. Im Kristall mit Verzerrung bleibt dann nach geschlossenem Umlauf ein Vektor \mathbf{b} übrig, der als **lokaler Burgersvektor** bezeichnet wird. Dieser weicht vom wahren Burgersvektor ab, da er von den lokalen Verzerrungen beeinflusst wird.

Abb. 2.9 begründet anschaulich, warum Versetzungen in Kristallen zumeist einen Burgersvektor besitzen, der sich als *Linearkombination von Gittertranslationen* beschreiben läßt. In das unverzerrte einfach kubische Kristallgitter aus Abb. 2.9(a) wird zunächst eine Stufenversetzung eingebaut, deren Burgersvektor gerade zwei äquivalente Atompositionen im Kristall verbindet (Abb. 2.9(b)). Die Fehlpassungsenergie dieser Konfiguration ist ausschließlich im Versetzungskern lokalisiert. Solche Versetzungen werden als **perfekte Versetzungen** bezeichnet. Ein halb so großer Burgersvektor wie in Abb. 2.9(c) gezeigt, führt zu einer Konfiguration mit weitreichender Fehlpassung in der Ebene AB . Mit dieser **imperfekten Versetzung** ist eine divergente Fehlpassungsenergie verbunden.

Insbesondere weisen die Versetzungen den kleinstmöglichen Burgersvektor auf, also einen einer *primitiven Translation* des Gitters entsprechenden. Dies läßt sich mit dem **Frankschen Regel** begründen, die auf Gleichung (2.11) für die elastische Energie zurückgeht. Sie besagt, daß eine Versetzung mit Burgersvektor \mathbf{b}_1 genau dann in ein Paar

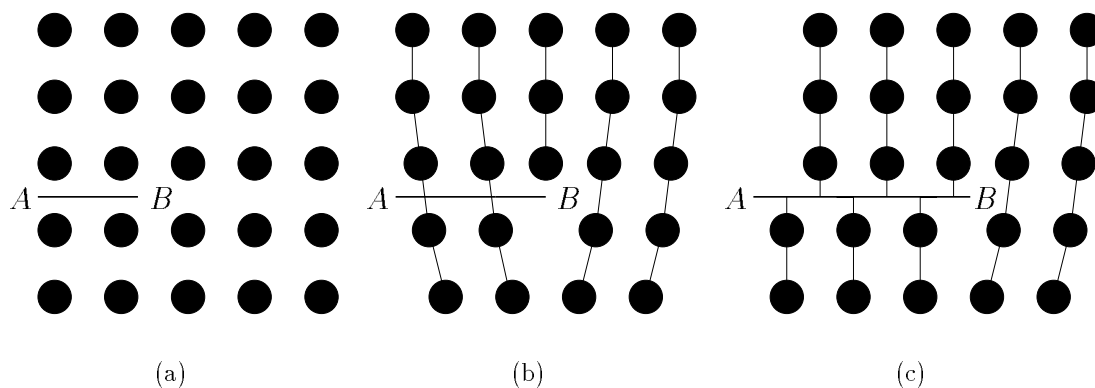


Abbildung 2.9: Perfekte und imperfekte Versetzungen: Einfach kubischer Kristall ohne Versetzung (a), mit einer Versetzung mit Burgersvektor der Länge einer Gitterkonstanten (b), mit einer Versetzung mit halb so großem Burgersvektor (c).

perfekter Versetzungen mit Burgersvektoren \mathbf{b}_2 und \mathbf{b}_3 dissoziiert, wenn

$$|\mathbf{b}_1|^2 > |\mathbf{b}_2|^2 + |\mathbf{b}_3|^2 \quad (2.13)$$

gilt. Umgekehrt vereinigen sich zwei Versetzungen, zwischen denen eine anziehende Kraft herrscht, zu einer einzigen, wenn die Umkehrung von Gleichung (2.13) gilt. Durch Einsetzen überzeugt man sich, daß eine Versetzung, deren Burgersvektor ein Vielfaches einer primitiven Translation ist, stets dissoziiert.

2.3.1 Besondere Punkte auf der Versetzungslinie

Während die Versetzungslinie im Kontinuumbild als glatte, sich stufenlos krümmende Linie im Raum betrachtet wurde, kann dies in einer atomistischen Betrachtung nicht mehr gelten. Je nach Orientierung des Versetzungskernes wird dieser eine größere oder kleinere Zahl von Atomen umfassen und damit eine unterschiedliche Energie besitzen. Die Versetzung wird dabei eine Orientierung mit minimaler Kernenergie anstreben. Je stärker der kovalente Charakter der Bindungen der beteiligten Atome ist (je „gerichteter“ die Bindungen sind) desto stärker wird die Versetzungslinie sich in ihrem Verlauf an den kristallographischen Achsen orientieren und aus einer Reihe geradliniger Abschnitte bestehen.

Betrachtet man die geknickte Versetzungslinie $ABCDEFGH$ einer Stufenversetzung parallel zur y -Achse mit Burgersvektor in x -Richtung in Abb. 2.10(a). Der Abschnitt $EFGH$ besteht aus zwei Segmenten EF und GH parallel zur y -Achse, die durch ein Segment FG in Burgersvektorrichtung verbunden sind. Er wird als **Kinke** bezeichnet. Der Abschnitt $CDEF$ besteht ebenfalls aus zwei Segmenten (CD und EF) parallel zur Versetzungslinie, jedoch sind sie durch ein Segment DE senkrecht zur Gleitebene miteinander verbunden. Dieser Abschnitt wird als **Sprung** bezeichnet.

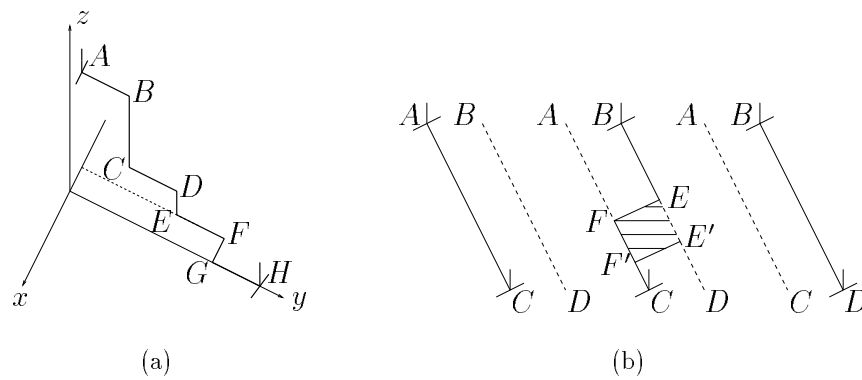


Abbildung 2.10: Kinken und Sprünge. Im rechten Teilbild ist eine Gleitbewegung durch Ausbilden und Verschieben einer Kinke dargestellt.

Kinken spielen eine Rolle bei der Gleitbewegung von Versetzungen, wie das Beispiel der Stufenversetzung in Abb. 2.10(b) zeigt. Ausgangspunkt ist das linke Teilbild mit der Versetzungslinie zwischen den Punkten A und B , im Endzustand der Bewegung befindet sie sich zwischen C und D (rechtes Teilbild). Dies entspricht der Gleitbewegung aus Abb. 2.5, die dort als Bewegung der gesamten Versetzung über die Gleitebene hinweg interpretiert wurde. Oft ist jedoch eine Bewegungsform realisiert, wie sie das mittlere Teilbild darstellt. Der Teil der Versetzung oberhalb von Punkt E hat sich schon unter Ausbildung einer Kinke $BEFC$ vorwärts bewegt, der Teil unterhalb von Punkt C verharret noch auf der ursprünglichen Position. Die weitere Gleitbewegung geht durch eine Verschiebung der Kinke $BEFC$ auf die Position $BE'FC'$ vonstatten.

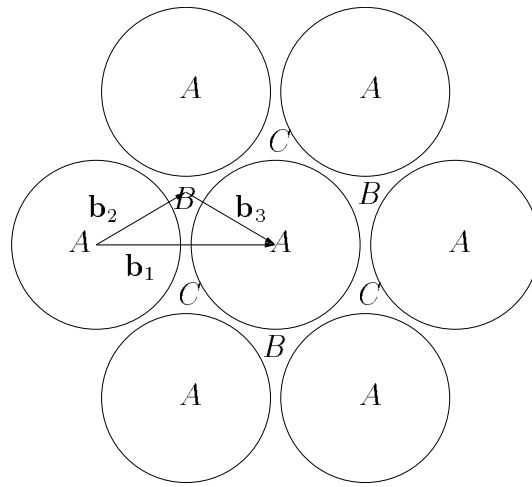
Ebenso kann eine Kletterbewegung durch Ausbildung und Verschiebung eines Sprunges beschrieben werden.

Der Effekt, daß bei einer Versetzungsbewegung durch Ausbildung von Kinken die Versetzungslinie an bestimmten Punkten (in Abb. 2.10(b) der Punkt F) „festgeheftet“ zu sein scheint, wird als **Pinning** bezeichnet. Er tritt vor allem an punktförmigen Kristalldefekten³ auf.

2.3.2 Partialversetzungen

Perfekte Versetzungen bedeuten nicht immer die energetisch günstigste Konfiguration. In einigen Kristallen ist die in Abb. 2.9(c) dargestellte Fehlpassungsenergie gering im Vergleich zur Versetzungskernenergie und es treten imperfekte Versetzungen auf, sogenannte **Partialversetzungen**. Ein Beispiel hierfür ist das fcc-Gitter. In Abb. 2.11 ist eine der vier möglichen Gleitebenen vom $\{111\}$ -Typ dargestellt. Normal zu ihr liegt eine Schichten-

³Typische Vertreter solcher Defekte sind **Frenkel-** und **Schottkydefekte**. Bei ersterem ist ein Atom von seinem Gitterplatz auf einen Zwischengitterplatz gewandert, bei letzterem fehlt es und hinterläßt eine Leerstelle.

Abbildung 2.11: Blick auf eine $\{111\}$ -Ebene eines fcc-Gitters.

folge $ABCABC$ vor und eine perfekte Versetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}[\bar{1}01]$ verbände äquivalente Gitterplätze. Betrachtet man hingegen eine Versetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{6}[\bar{2}11]$, so wird die perfekte Schichtenabfolge gestört: ein **Stapelfehler** tritt auf, und die Schichtenfolge ändert sich zu $ABCA|CABC$ (der senkrechte Strich markiert den Stapelfehler). Dieser trägt eine Energie pro Längeneinheit $\gamma_f > 0$, so daß eine einzelne Partialversetzung keine stabile Konfiguration darstellt. Durch eine zweite Partialversetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b}_3 = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ kann die perfekte Schichtenfolge wiederhergestellt werden.

In diesem Fall überwiegt der Energiegewinn durch Dissoziation der perfekten Versetzung die Stapelfehlerenergie. Trotz der zwischen ihnen herrschenden abstoßenden Kraft können die Partialversetzungen sich nicht beliebig weit voneinander entfernen, da die ihrem Abstand proportionale Stapelfehlerenergie eine Rückstellkraft bewirkt. Aus der Gesamtenergie

$$W(d) = \gamma_f d + \frac{\mu b_2^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{d} \quad (2.14)$$

der Konfiguration ergibt sich durch Minimieren nach dem Abstand d der Gleichgewichtsabstand

$$d_0 = \frac{\mu b_2^2}{2\pi(1-\nu)\gamma_f}. \quad (2.15)$$

2.3.3 Superversetzungen

Ebenfalls zu den imperfekten Versetzungen zählen die **Superversetzungen** in geordneten Legierungen. Betrachtet man hierzu ein B2-Kristallgitter wie in Abb. 2.12(a), dessen Gitterplätze von zwei verschiedenen Atomsorten A und B besetzt werden. Im ungeordneten

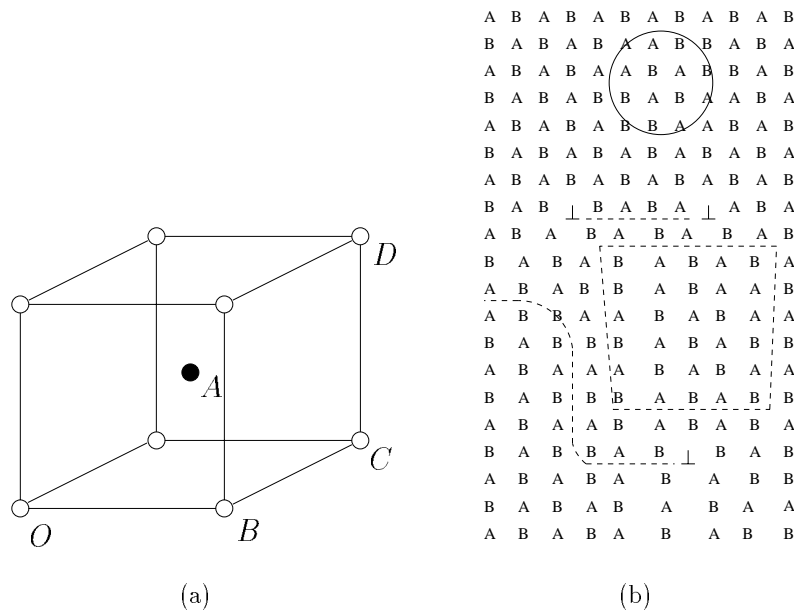


Abbildung 2.12: Superversetzungen: Elementarzelle im B2-Gitter (a) und zweidimensionale Veranschaulichung einer geordneten Legierung mit verschiedenen Versetzungen (b).

Fall geschieht dies völlig regellos, es entsteht ein *einfach kubisches* Gitter mit Gitterkonstante a_0 , entsprechend dem Abstand OB . Die beiden auftretenden Versetzungen haben die — kürzestmöglichen — Burgersvektoren OA bzw. OB ; diese entsprechen den $[100]$ - bzw. $[111]$ -Richtungen. Es handelt sich dabei um perfekte Versetzungen.

Von einer geordneten Legierung spricht man, wenn die durch helle Kreise gekennzeichneten Gitterpunkte mit Atomen der Sorte A, die anderen mit Atomen der Sorte B besetzt werden. Das Kristallgitter zerfällt in zwei **Supergitter**, die nur aus Atomen einer einzigen Sorte bestehen, dabei ist jedes Atom von acht Atomen der anderen Sorte umgeben. Eine Oberfläche über die hinweg die Kristallstruktur und -orientierung gleich bleibt, jedoch Atome die falschen Nachbaratome besitzen heißt Antiphasengrenze. Sie grenzt zwei Supergitterdomänen voneinander ab. Die Versetzung mit Burgersvektor OA ist nun eine imperfekte Versetzung. Sie stellt den Rand einer **Antiphasengrenze** dar.

Im zweidimensionalen Analogon Abb. 2.12(b) sind diese Sachverhalte veranschaulicht. Man erkennt drei Supergitterdomänen. Die Antiphasengrenzen bestehen im einen Fall aus geraden Abschnitten, im anderen Fall stellen sie eine gekrümmte Linie dar. Durch das Zeichen \perp symbolisiert ist die — im ungeordneten Fall perfekte — Versetzung vom Typ $[10]$. Jeweils zwei solche Versetzungen liegen an den Rändern einer Antiphasengrenze. Die Bewegung einer Superversetzung vom Typ $[20]$ hingegen läßt einen perfekt geordneten Kristall zurück. Allerdings zerfällt sie leicht in zwei $[10]$ -Versetzung mit dazwischenliegender Antiphasengrenze.

Ein wesentlicher Unterschied zwischen Superversetzungen und den weiter oben disku-

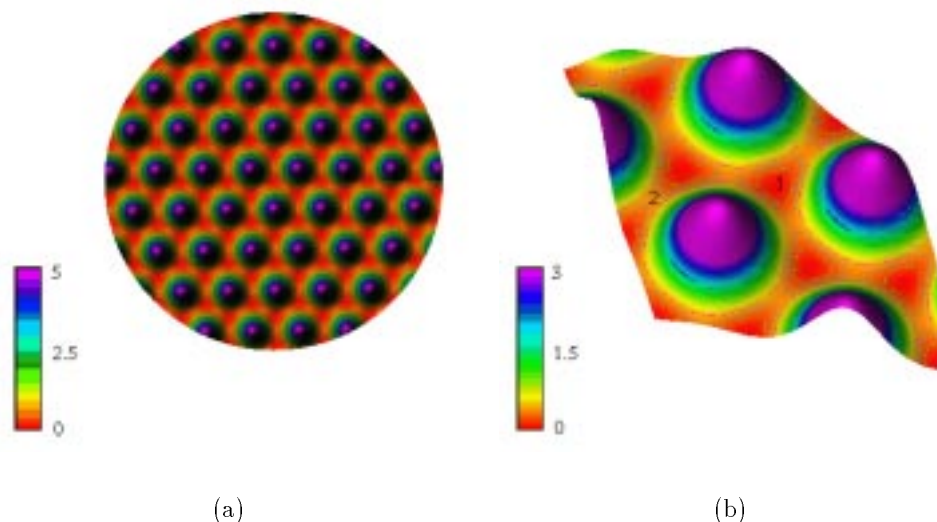


Abbildung 2.13: Gamma-Oberfläche eines fcc-Kristalls ($\{111\}$ -Ebene) (a) und vergrößerter Ausschnitt (b).

tierten Partialversetzungen besteht in ihrer unterschiedlichen Orientierungsabhängigkeit. Bei einem Stapelfehler stimmt die Anzahl der Bindungen sowie deren Orientierung nicht mit dem perfekten Gitter überein und folglich existieren nur wenige ausgezeichnete Richtungen für die die Stapelfehlerenergie hinreichend niedrig für die Existenz von Partialversetzungen ist. Bei Superversetzungen sind sowohl Bindungsanzahl als auch -orientierung „korrekt“, so daß die Richtungsabhängigkeit der Antiphasengrenzenergie oftmals nur gering ist. In diesem Fall können stufenlos gekrümmte Grenzkurven wie im unteren Teil von Abb. 2.12(b) auftreten, der gerade Verlauf wie im oberen Teil träte bei einer größeren Richtungsabhängigkeit auf.

Ein wichtiger Unterschied zwischen einem Stapelfehler und einer Antiphasengrenze besteht darin, daß ersterer auf eine Ebene zwischen den beiden begrenzenden Partialversetzungen beschränkt ist. Die Antiphasengrenze hingegen kann einen gekrümmten Verlauf nehmen.

2.3.4 Der generalisierte Stapelfehler und die Gamma-Oberfläche

Eine auf VITEK [52] zurückgehende Methode zur Bestimmung der Struktur einer Versetzung besteht in der Berechnung der Energie des **generalisierten Stapelfehlers (GSF)**, der sich aus einer starren Verschiebung zweier Kristallhälften gegeneinander ergibt. Man erhält eine Fläche $E = E(\mathbf{r})$ im Raum, die **Gamma-Oberfläche**, wobei $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^2$ den Verschiebungsvektor der Kristallhälften gegeneinander bezeichnet.

In Abb. 2.13(a) ist die Gamma-Oberfläche für eine $\{111\}$ -Ebene eines fcc-Kristalls abgebildet. Die Translations- und Rotationssymmetrien des Kristalls zeigen sich auch in der

Gamma-Oberfläche. In der Ausschnittsvergrößerung in Abb. 2.13(b) ist deutlich zu erkennen, daß die Stapelfehlerenergie für eine Verschiebung um den Burgersvektor \mathbf{b}_2 einer Partialversetzung relativ niedrig ist (Position 2). Betrachtet man dagegen den Burgersvektor \mathbf{b}_1 der perfekten Versetzung (Position 1), so erkennt man, daß die Stapelfehlerenergie für seinen halben Wert maximal wird, was auf eine hohe Versetzungskernenergie schließen läßt.

2.3.5 Das Peierls-Nabarro-Modell einer Versetzung

Um das Gleiten einer Versetzung korrekt zu beschreiben, muß die atomistische Struktur in die Beschreibung miteinbezogen werden. Wie eingangs schon erwähnt wurde, nahm FRENKEL in seiner Rechnung zum Schermodul eines Kristalls ein in den Gitterabständen periodisches Potential an. DEHLINGER und KOCHENDÖRFER [12] setzten eine Stufenversetzung einem solchen Potential aus und verwendeten Ergebnisse früherer Untersuchungen von FRENKEL und KONTOROVA [22]. Ihr Modell zeichnet sich vor allem durch die qualitativ richtige Wiedergabe des Gleitprozesses sowie seine Einfachheit aus.

1940 gab PEIERLS [40] eine Lösung für das Verschiebungsfeld einer Versetzung an, NABARRO [37] führte 1947 Korrekturen und Erweiterungen zu diesem Modell an, das es insbesondere ermöglicht, die Weite einer Versetzung zu bestimmen und Abschätzungen für die Versetzungskernenergie anzugeben.

Ausgangspunkt ist ein einfach kubischer Kristall mit einer Stufenversetzung mit Burgersvektor $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$ und Versetzungslinie $\xi \parallel \mathbf{e}_y$ durch $(x, z) = (0, 0)$ (Abb. 2.14). Da die Versetzung als unendlich ausgedehnt in y -Richtung angesehen wird, hat man es mit einem ebenen Problem der Verzerrungen und Spannungen in x - und z -Richtung zu tun.

Nahe der Versetzungslinie liegende Atome werden, sofern sie sich oberhalb der Gleitebene P befinden, nach außen verschoben, andernfalls nach innen. Die auf den benachbarten Ebenen A und B liegenden Atome befinden sich somit für genügend großen horizontalen Abstand zur Versetzungslinie S in korrekter gegenseitiger Lage. Sie sind zwei verschiedenen Wechselwirkungen ausgesetzt, im Falle der Ebene A sind dies

- (i) Wechselwirkung mit Atomen aus dem Halbraum a. Die resultierenden Kräfte suchen die Atome gleichmäßig über A zu verteilen. Dies führt zu einer Aufweitung der Versetzung.
- (ii) Wechselwirkung mit Atomen aus dem Halbraum b. Diese Kräfte versuchen die korrekte Atomlage des Kristalls wiederherzustellen, woraus eine Verringerung der Versetzungsweite folgt.

Zwischen den sich ausbildenden Spannungen wird sich ein Gleichgewicht einstellen.

PEIERLS nahm an, daß die Ausdehnung der Versetzung groß gegenüber dem Atomabstand d sei. Dann sind die relativen Auslenkungen u und w in horizontale und vertikale Richtung klein gegen d , so daß beide Kristallhälften als elastisches Kontinuum angesehen werden können. Aus Symmetriegründen kann $w = 0$ angenommen werden. Die Spannung

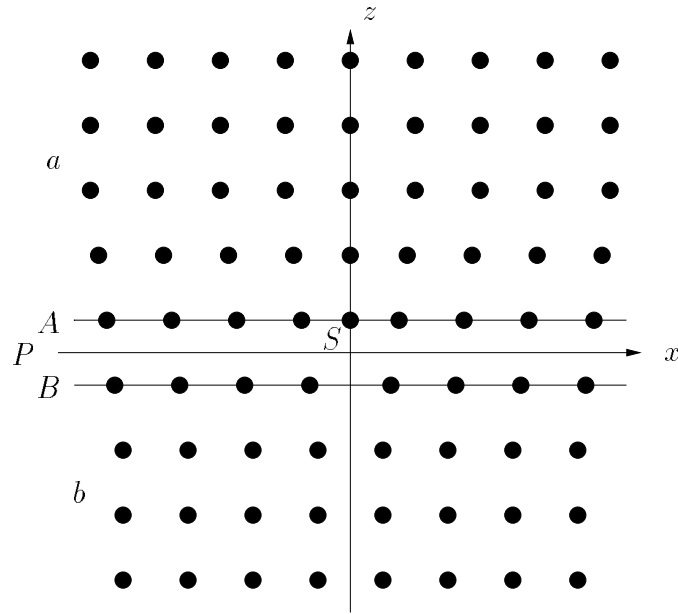


Abbildung 2.14: Zum Peierls-Nabarro-Modell.

aus (i) ist dann genau jene Spannung σ_{xy}^{kont} die gebraucht wird, um die horizontale Verschiebung $u = u(x)$ aufzubringen. Nach ESHELBY [19] gilt hierfür

$$\sigma_{xy}^{kont}(x, 0) = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x-x'} \Big|_{x=x'} \frac{\partial u_x}{\partial x} dx', \quad (2.16)$$

wobei ν die Poisson-Zahl bezeichnet.

In ähnlicher Weise kann angenommen werden, daß die Spannung (ii) nur von u abhängt. Sie muß gleichzeitig eine periodische Funktion der Gitterkonstanten d sein, was am einfachsten durch $\sigma_{xy}^{atom}(x, 0) = \text{const} \sin(\frac{2\pi u}{d})$ erfüllt werden kann. Die Konstante ergibt sich aus der Bedingung, daß das Hookesche Gesetz $\sigma_{xy}^{atom} = -\mu \frac{u}{d}$ für kleine Verschiebungen u Gültigkeit besitzen muß. Man erhält

$$\sigma_{xy}^{atom}(x, 0) = -\frac{\mu b}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u_x}{b}. \quad (2.17)$$

Gleichsetzen der beiden Ausdrücke liefert die **Peierlssche Integralgleichung**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x-x'} \Big|_{x=x'} \frac{\partial u_x}{\partial x} dx' = \frac{b(1-\nu)}{2d} \sin \frac{4\pi u_x}{b}, \quad (2.18)$$

deren Lösung sich zu

$$u_x = -\frac{b}{2\pi} \arctan \frac{x}{\zeta} \quad (2.19)$$

ergibt. Hierbei ist $\zeta = \frac{d}{2(1-\nu)}$ die **Weite** der Versetzung⁴.

Von weiterem Interesse ist die kritische äußere Spannung σ_{krit} , die nötig ist, um die Versetzung entlang der Gleitebene zu bewegen. In der Kontinuumsnäherung ist σ_{krit} beliebig klein, da die Versetzung an jedem Punkt der Gleitebene eine Gleichgewichtslage einnimmt, d.h. ihre Energie nicht von der Position x abhängt. Berücksichtigt man jedoch die atomistische Struktur des Kristalls, so erhält man auf der Gleitebene eine periodische Abfolge von stabilen Gleichgewichtslagen, die einer endlichen äußeren Spannung widerstehen können.

Die Energie der Versetzung teilt sich in die elastische Verzerrungsenergie, die in den beiden Kristallhälften gespeichert ist, und die Fehlpassungsenergie im Kern auf. Erstere ergibt sich durch Integration der Spannungen zu

$$\frac{W_e}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{2\zeta} \quad (2.20)$$

was Gleichung (2.11) entspricht, wenn der innere Abschneideradius r_0 durch 2ζ ersetzt wird. Versucht man analog — d.h. durch Integration des Ausdrucks für σ_{xy}^{atom} — die Fehlpassungsenergie zu berechnen, so mittelt sich deren Gitterperiodizität wie oben angedeutet, heraus; man erhält $W_f = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}$. PEIERLS und NABARRO gingen daher zu einer Summation über die Atompositionen über und berechneten die potentielle Energie einer Atomreihe in der Ebene A unter Einfluß der Ebene B in Abhängigkeit von der relativen Verschiebung $\alpha = u/d$ zu

$$W(\alpha) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} + \frac{W_p}{2} \cos 4\pi\alpha. \quad (2.21)$$

Hierbei bezeichnet W_p die **Peierls-Energie**. Sie entspricht der Höhe des zu überwindenden Potentialwalles. Dazu ist die **Peierls-Spannung** σ_p erforderlich, die sich zu

$$\sigma_p = \frac{1}{b^2} \frac{\partial W(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{2\pi W_p}{b^2} = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{4\pi\zeta}{b}\right) \quad (2.22)$$

ergibt. Da man bei der Bewegung über einen solchen Potentialberg hinweg auch Auslenkungen normal zur Gleitebene erwartet, liefert die Peierlsspannung einen zu kleinen Wert für σ_{krit} .

2.4 Versetzungen in Quasikristallen

Seit 1989 beschäftigt sich die experimentelle Forschung mit der Untersuchung von Versetzungen in Quasikristallen. Numerische Simulationen wurden kurz darauf von MIKULLA ET AL. durchgeführt [27], [36]. Über beide Bereiche soll in diesem Abschnitt ein kurzer Überblick gegeben werden. Zuvor soll jedoch der Versetzungsbegriff für Quasikristalle präzise gefaßt werden, auch werden zwei Konstruktionsmethoden vorgestellt.

⁴für eine Schraubenversetzung ist hier und im folgenden analog zu Gleichung (2.11) der Term $1-\nu$ zu streichen

2.4.1 Kontinuumstheorie für Quasikristalle

Die lineare Elastizitätstheorie läßt sich weitgehend auf Quasikristalle übertragen [3]. Sämtliche Größen müssen jetzt sowohl im physikalischen als auch im Orthogonalraum betrachtet werden, z.B. gilt für die Verschiebung $\mathbf{u} = (\mathbf{u}^{\parallel}, \mathbf{u}^{\perp})^T$. Allerdings ist zu beachten, daß \mathbf{u}^{\parallel} und \mathbf{u}^{\perp} in zwei verschiedenen Räumen liegen und ein unterschiedliches Transformationsverhalten aufweisen. Es läßt sich ein Hookesches Gesetz mit einem Tensor der elastischen Konstanten angeben. Dieser enthält im isotropen Fall nunmehr 5 unabhängige Einträge, von denen zwei rein phononische Anteile beschreiben (und damit den Lamé-Konstanten entsprechen), zwei rein phasonische Anteile beschreiben und einer phononische und phasonische Anteile koppelt.

Der Burgersvektor einer Versetzung kann über einen verallgemeinerten Burgersumlauf im sechsdimensionalen Hyperraum definiert werden:

$$\mathbf{b} = \oint_C d\mathbf{u}, \quad \mathbf{u}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^6. \quad (2.23)$$

Er läßt sich wie das Verschiebungsfeld in eine phononische und eine phasonische Komponente \mathbf{b}^{\parallel} bzw. \mathbf{b}^{\perp} zerlegen. Stets sind *beide* Komponenten von null verschieden, jede Versetzung bringt also ein phasonisches Verzerrungsfeld mit sich, das oft als „Phasonenwolke“ bezeichnet wird. Die relativ hohen Relaxationszeiten des phasonisches Verzerrungsfeldes führen zu einer geringeren Versetzungsbeweglichkeit in Quasikristallen.

2.4.2 Konstruktion von Versetzungen in Quasikristallen

Es liegt nahe zu versuchen, mittels eines erweiterten Volterraprozesses Versetzungen in Quasikristallen zu konstruieren. Dies ist in der Tat möglich [6] [5]. Statt einer Halbebene wird ein Halbband bzw. eine Halbschicht entfernt, wie in Abb. 2.15(a) dargestellt. Die entstandenen Oberflächen auf beiden Seiten des Bandes passen bis auf einen Bereich in unmittelbarer Nähe des Versetzungskernes perfekt aufeinander und könnten durch eine stetige Verzerrung zusammengefügt werden. Jedoch entstünde auf diese Weise ein linienförmiger Stapelfehler, der auch als **Phasenwand** bezeichnet wird. Ursache hierfür ist die Verschiebung des Akzeptanzbereiches um die Projektion \mathbf{b}^{\perp} des Schichtvektors \mathbf{b} . Die Versetzung wäre durch den Stapelfehler im Unendlichen sichtbar.

Daher muß in Quasikristallen der Volterra-prozeß am Hypergitter durchgeführt werden. Damit wird jedoch dessen Translationssymmetrie gebrochen, so daß die entstehenden Hyperoberflächen nicht mehr perfekt aufeinanderpassen (was die Ursache für den Stapelfehler darstellt). Die Lösung liegt in einer Verbiegung des Auswahlstreifens (genauer: einer Interpolation zwischen den beiden Hyperoberflächen), wodurch wiederum eine perfekte Passung der beiden Hyperoberflächen entsteht. Man hat damit durch Projektion einer Versetzung des periodischen sechsdimensionalen Hypergitters eine Versetzung im Quasikristall erzeugt (Abb. 2.15(b)). Allerdings finden sich über das gesamte Muster verteilt Stellen, an denen außerordentliche Vertizes (durch Punkte markiert) entstanden sind. Sie treten im idealen Muster nicht auf und stellen phasonische Defekte dar.

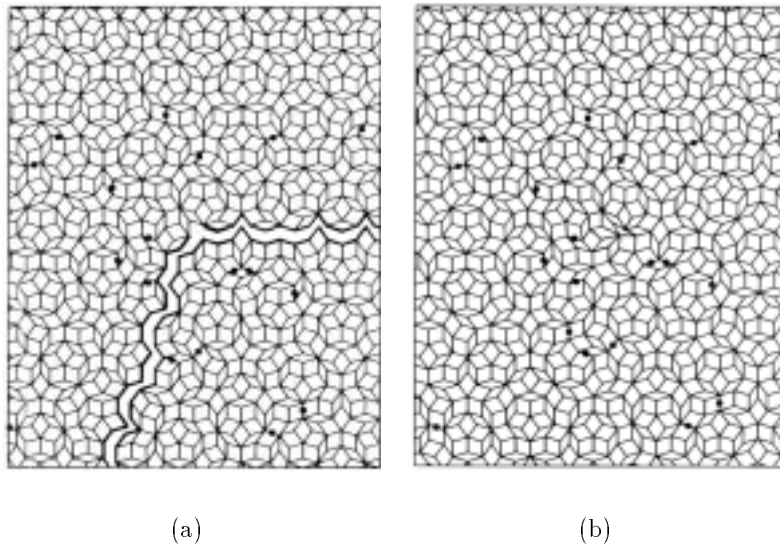


Abbildung 2.15: Erweiterter Volterra-Prozess zur Konstruktion einer Stufenversetzung in Quasikristallen. Die Punkte markieren Vertexumgebungen, die im idealen Tiling nicht vorkommen.

DILGER [15] benutzte diese *geometrische* Konstruktion, um in seine Probe eine Versetzung einzubauen. In Schersimulationen konnte die Mobilität dieser Versetzung nachgewiesen werden. Auch führte er Schersimulationen am perfekten Quasikristall durch und beobachtete die Entstehung eines Versetzungsdipols⁵. Er bestimmte die Burgersvektoren mit Hilfe von Burgersumläufen. Aufgrund der starken Verzerrungen in der Nähe der Versetzungslinie konnten nur relativ wenige solche Umläufe durchgeführt werden. Daher war eine detaillierte Bestimmung des Verlaufes der Versetzungslinie nicht möglich.

In der vorliegenden Arbeit wird eine grundsätzlich andere Konstruktionsmethode angewandt. Für die zu untersuchende Gleitebene wird die Gamma-Oberfläche berechnet und auf lokale Minima untersucht. Deren Ortsvektoren werden als Burgersvektoren der Versetzungen verwendet, da zu erwarten ist, daß die so erzeugten Versetzungen die höchste Beweglichkeit aufweisen. Der Einbau erfolgt durch Aufprägen des Verschiebungsfeldes nach PEIERLS-NABARRO (Gleichung(2.19)) auf den ursprünglichen Quasikristall.

Eine Untersuchung durch Burgersumläufe ist somit nicht mehr möglich, andererseits kann, da der Einbau der Versetzung lediglich durch Verschieben der Atome der Referenzprobe geschah, stets das Verschiebungsfeld untersucht werden. Besonderes Augenmerk wird dabei auf den Versetzungskern gelegt, durch Vergleich mit dem von der Theorie vorhergesagten Verschiebungsfeld nach Gleichung (2.19) kann die Versetzungsweite bestimmt werden. Des weiteren werden spezielle, in Abschnitt 3.7 beschriebene Visualisierungsverfahren

⁵Ein Versetzungsdipol besteht aus zwei Versetzungen mit entgegengesetztem Burgersvektor. In DILGERS Simulation entstand er aufgrund der periodischen Fortsetzung der Probe.

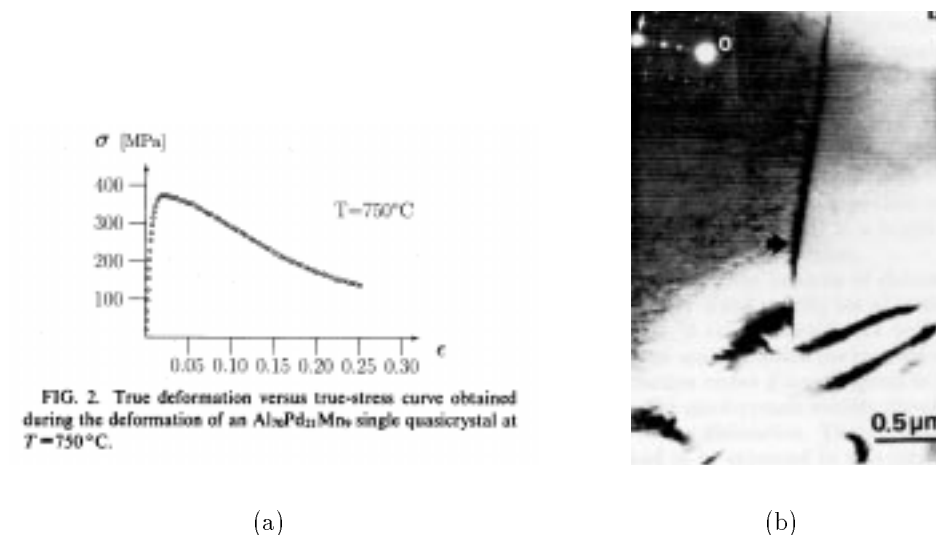


Abbildung 2.16: Gemessene Spannungs-Dehnungs-Kurve von AlPdMn (a) (aus [54]) und elektronenmikroskopische Hellfeldaufnahme einer Versetzung in AlCuFe (b) (aus [55]).

angewendet.

2.4.3 Experimentelle Untersuchungen

1989 wiesen sowohl DEVAUD-RZEPSKY [13] als auch ZHANG und URBAN [57] die Existenz von Versetzungen in Quasikristallen nach.

Die Entdeckung der stabilen Phase von AlPdMn durch TSAI ET AL. im Jahre 1990 [50], die es erlaubte, erstmals Proben im cm^3 -Bereich herzustellen, ebnete den Weg für Verformungsexperimente. 1993 wiesen WOLLGARTEN ET AL. [54] die plastische Verformung von Quasikristallen unter Beteiligung von Versetzungen nach. Sie deformierten eine AlPdMn-Probe bei 750°C um 25 % und maßen eine Versetzungsdichte von $7 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$, was zwei Größenordnungen über dem Wert einer nichtdeformierten, jedoch ansonsten gleichbehandelten Referenzprobe lag. Abb. 2.16(a) zeigt die zugehörige Spannungs-Dehnungs-Beziehung. Bemerkenswert ist, daß keine Verfestigung auftritt, ein Resultat, das von BRESSON [8] bestätigt wurde.

Später gelangen WOLLGARTEN ET AL. sogar in-situ-Aufnahmen sich bewegender Versetzungen in AlPdMn [53]. Dazu fertigten sie Hellfeldabbildungen der deformierten Proben im Elektronenmikroskop an. Abb. 2.16(b) zeigt eine solche Aufnahme einer Versetzung in AlCuFe.

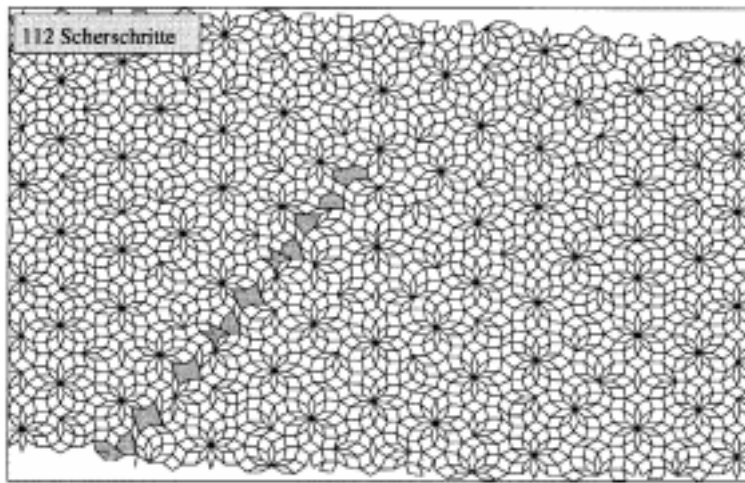


Abbildung 2.17: Momentaufnahme der Schersimulation aus [36]. Eine Versetzung hat sich vom unteren Rand in die Probe hineinbewegt und einen Stapelfehler zurückgelassen.

2.4.4 Numerische Simulationen

Erste numerische Simulationen zur Versetzungsbewegung an Quasikristallen wurden von MIKULLA ET AL. durchgeführt. Es wurden rechteckige Ausschnitte eines zweidimensionalen binären Tilings verwendet, das eine Dekoration des Penroseusters darstellt und auf LANÇON und BILLARD zurückgeht [32] [33]. Zunächst wurden statische Schersimulationen durchgeführt, indem an zwei gegenüberliegenden Rändern etwa 16 % der Probenausdehnung umfassende Streifen schrittweise starr um 1 % des kleinsten Abstandes zweier Atome verschoben wurden. Zwischen den einzelnen Schritten fand eine Relaxation statt, d.h. die Atome bewegten sich gemäß den Newtonschen Bewegungsgleichungen in ein Minimum der potentiellen Energie. Die interatomaren Kräfte wurden aus einem Lennard-Jones-Potential berechnet. Das Verfahren ist ein Modell für eine Scherung am absoluten Temperaturnullpunkt.

MIKULLA beobachtete das Entstehen einer Versetzung am Rand der Probe (Abb. 2.17). Von dort wanderte sie entlang einer dicht gepackten Richtung durch den Quasikristall und hinterließ einen Stapelfehler. Nach Erreichen des gegenüberliegenden Randes war die eine Hälfte der Probe gegenüber der anderen um den Burgersvektor, der einem Quasigittervektor entsprach, abgeschert. Die Bewegung war eine reine Gleitbewegung, ein Klettern fand nicht statt. Das in Bezug auf die Ausgangskonfiguration berechnete Verschiebungsfeld zeigte einen der PEIERLS-NABARRO-Lösung ähnlichen Verlauf.

In einer weiteren Reihe von Rechnungen wurde eine kontinuierliche Scherung bei konstanter Temperatur simuliert. Dazu wurde in die Bewegungsgleichungen um einen Nosé-Hoover-Thermostat erweitert und die jetzt 15970 Teilchen umfassende Probe in jedem Zeitschritt um $10^{-4}\%$ der Quasigitterkonstanten homogen verzerrt. Auch hier konnte das Auftreten von Versetzungsdipolen beobachtet werden: Sie entstanden aus instabil geworde-

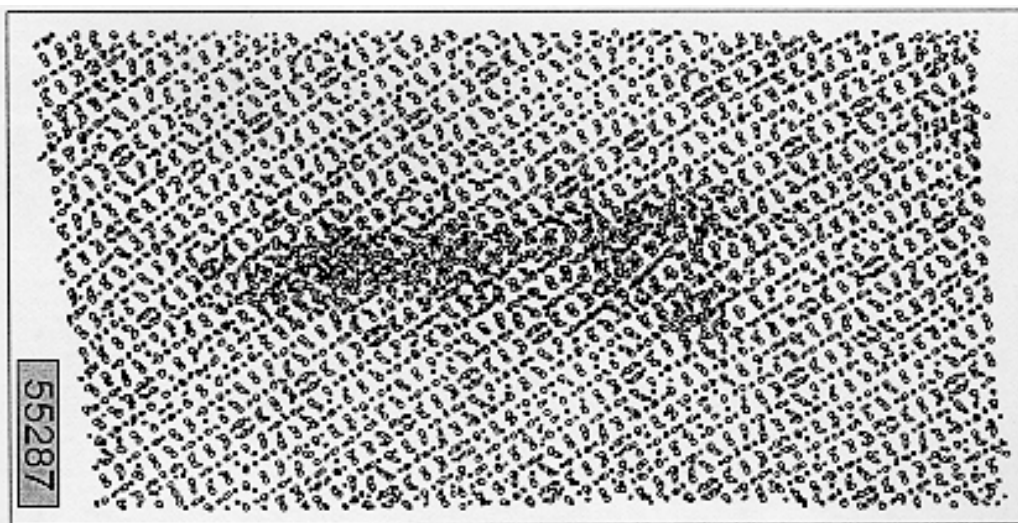


Abbildung 2.18: Momentaufnahme der Schersimulation aus [15], Blick in Richtung der Versetzungslinie. Die eingebaute Versetzung ist gewandert und hat einen Stapelfehler hinterlassen.

nen Schwingungsmoden des Quasikristalls. Die zurückgelassene Stapelfehlerwand begünstigte im weiteren Verlauf der Simulation die Entstehung von Versetzungsdipolen, was als Erklärung für die Superplastizität dienen könnte.

Des Weiteren wurde ein Einfluß der Temperatur auf die Versetzungsbewegung festgestellt. Bei höheren Temperaturen vermieden die Versetzungen das Durchqueren hochkoordinierter Cluster, indem sie ihnen durch Kletterbewegung auswichen.

Statische Schersimulationen an dreidimensionalen Quasikristallen wurden 1995 von DILGER [14] durchgeführt. Er konnte an einem 32027 Atome umfassenden Approximanten des binären ikosaedrigen Tilings sich bewegende Versetzungen, die eine Stapelfehlerwand hinterließen, detektieren. Zunächst wurden die Randstreifen einer perfekten Probe schrittweise um 3 % der Quasigitterkonstanten verschoben und zwischen den einzelnen Schritten wie oben beschrieben relaxiert. Es entstand ein Versetzungsdipol in der Mitte der Probe mit Burgersvektor parallel zu einer dreizähligen Symmetrieachse und der Länge einer Rhomboederkante. Insbesondere wies der Burgersvektor auch eine Schraubenkomponente auf. Das Verhältnis von kritischer Spannung σ_{krit} zum Schubmodul μ betrug bei der Entstehung der Versetzung 0,14.

Bei ihrer reinen Gleitbewegung durch das Material hinterließen die Versetzungen einen Stapelfehler. Nach Verlassen der Probe war die eine Hälfte um einen Betrag, der in guter Näherung dem Burgersvektor entsprach, abgeglitten. Bei fortgesetzter Scherung entstand ein weiterer Versetzungsdipol bei einem Spannungs-Schubmodul-Verhältnis von 0,036, was auf die Schwächung des Materials durch den Stapelfehler zurückgeführt werden kann.

Es wurde eine weitere Schersimulation durchgeführt, wobei in die 22815 Atome enthaltende Probe eine Versetzung mittels des oben beschriebenen erweiterten Volterra-Prozesses

eingebaut wurde. Der Burgersvektor stand parallel zu einer fünfzähligen Richtung mit der Länge einer Rhomboederkante. Bei einer kritischen Spannung von 12 % des Schubmoduls setzte die plastische Deformation ein (Abb. 2.18). Die Versetzung spaltete in zwei halb so große Partialversetzungen auf, die sich zunächst voneinander entfernten und anschließend mit konstantem Abstand zueinander durch die Probe bewegten. Ihre Bewegung fand nicht auf der durch Versetzungslinie und Scherrichtung vorgegebenen Gleitebene statt, sondern auf einer Ebene senkrecht zu einer dreizähligen Symmetrieachse. Die beiden Ebenen nahmen einen Winkel von $10,8^\circ$ ein.

Bei beiden Simulationen konnte durch eine Zurücksetzung der Randstreifen eine Umkehrung der Versetzungsbewegung erreicht werden. Allerdings wurde die Stapelfehlerwand nicht völlig aufgelöst, es blieben Punktdefekte zurück.

Kapitel 3

Molekulardynamik und Visualisierung

Unter **Molekulardynamik** versteht man ein Simulationsverfahren zur Untersuchung von klassischen Vielteilchensystemen, insbesondere von Flüssigkeiten oder Festkörpern. Für jedes Teilchen werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen integriert. Damit können Gleichgewichtseigenschaften des Systems wie elastische Konstanten oder Phasendiagramme bestimmt werden und mit theoretischen Rechnungen oder Experimenten verglichen werden. Darüber hinaus kann auf mikroskopischer Ebene die zeitliche Entwicklung eines Systems verfolgt werden. Sämtliche Parameter sind innerhalb gewisser Grenzen beliebig variierbar, auch solche, die makroskopischen Messungen gar nicht zugänglich sind.

3.1 Allgemeine Vorgehensweise

Am Beginn einer Simulation steht ein Ausgangszustand, gegeben durch Orte und Impulse der N beteiligten Teilchen, die mit dem Index j von 1 bis N durchnummeriert seien:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_j(0) &= \mathbf{q}_j^{(0)} \\ \dot{\mathbf{q}}_j(0) &= \dot{\mathbf{q}}_j^{(0)}\end{aligned}\tag{3.1}$$

Das System wird nun sich selbst überlassen, d.h. die Teilchen können sich unter dem Einfluß der zwischen ihnen herrschenden Wechselwirkungen und gegebenenfalls äußerer Kräfte frei bewegen. Dazu werden die Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{p}}_j = \mathbf{F}_j = -\nabla_j V(\mathbf{q})\tag{3.2}$$

$$\dot{\mathbf{q}}_j = \frac{1}{m_j} \mathbf{p}_j\tag{3.3}$$

integriert, bis sich ein Gleichgewichtszustand eingestellt hat. Schließlich erfolgt eine Analyse des erhaltenen Zustands, z.B. hinsichtlich makroskopischer Größen wie mittlerer potentieller Energie oder Temperatur oder auch hinsichtlich mikroskopischer Eigenschaften; ein Beispiel hierfür ist die Untersuchung der diffusiven Bewegung einzelner Teilchen.

Die Integration erfolgt mittels einer Diskretisierung der Zeit. Ausgehend von dem bekannten Zustand $q_i(t), p_i(t)$ wird der Zustand $q_i(t + \delta t), p_i(t + \delta t)$ zu einem späteren Zeitpunkt $t + \delta t$ berechnet. Hierbei ist ein Zustand ein Punkt im — in dreidimensionalen Systemen — $6N$ -dimensionalen Phasenraum, der durch die drei kartesischen Komponenten q_i und p_i der N Teilchenorte bzw. der N Teilchenimpulse aufgespannt wird. Hieraus wird klar, daß die exakten Trajektorien im Phasenraum nicht bestimmt werden können, die Abweichungen wachsen mit der **Zeitschrittweite** δt . Da der Trajektorienverlauf ohnehin meist chaotisch ist, werden vergleichsweise große Fehler akzeptiert, solange sie sich bei der Berechnung von Observablen herausmitteln.

Eine Observable $A(t)$ ist eine Funktion der $(q_i(t); p_i(t))$, d.h.

$$A(t) = \tilde{A}(q_i(t); p_i(t)). \quad (3.4)$$

In einem Experiment, das ja stets eine endliche Zeit dauert, beobachtet man einen Mittelwert über die Meßzeit τ , das **Zeitmittel**

$$A_{\text{exp}} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \tilde{A}(q_i(t); p_i(t)) dt. \quad (3.5)$$

Dabei soll es sich um einen Gleichgewichtszustand handeln, so daß A_{exp} nicht zeitabhängig ist.

In der Molekulardynamik nimmt man an, daß das behandelte System quasiergodisch ist, d.h. jeder mit den Randbedingungen verträgliche Punkt des Phasenraums mit gleicher Wahrscheinlichkeit durchlaufen wird. Dann kann im Grenzfall unendlich langer Meßzeiten Gleichung (3.5) durch das **Scharmittel**

$$A_{\text{exp}} = \int_{q_i; p_i} \tilde{A}(q_i(t); p_i(t)) \rho(q_i; p_i) dpdq \quad (3.6)$$

ersetzt werden. Hierbei stellt $\rho(q_i; p_i) dpdq$ die Wahrscheinlichkeit dar, daß das System im Phasenraumvolumen $dpdq$ angetroffen wird. $\rho(q_i; p_i)$ wird als **Phasenraumdichte** bezeichnet.

Offenbar muß die Trajektorie $(q_i(t); p_i(t))$ lediglich die richtige Phasenraumdichte wiedergeben, d.h. Abweichungen von der echten Trajektorie sind solange unbedeutend, wie sie sich bei der Observablenberechnung nach Gleichung (3.6) herausheben. Allerdings zeigen diese Überlegungen ein großes Problem auf, das bei Molekulardynamiksimulationen stets bedacht werden muß. Die Güte der erhaltenen Ergebnisse hängt davon ab, wie groß die Teilregion des Phasenraums ist, die in der endlichen Simulationszeit durchlaufen wird. Es kann insbesondere passieren, daß das System bei ungünstigen mikroskopischen Anfangsbedingungen relativ lange in einem begrenzten Gebiet des Phasenraums „gefangen“ bleibt.

Im folgenden wird zunächst der in dieser Arbeit verwendete Integrator vorgestellt, woran sich eine Diskussion seiner Eigenschaften anschließt. Darauf folgt eine Diskussion des verwendeten Potentials und der Kraftberechnung. Der nächste Abschnitt erläutert verschiedene Probleme, die bei der numerischen Implementierung auftreten und schildert deren Lösung.

3.2 Integratoren

Die Form der Bewegungsgleichungen und verschiedene rechen-technische oder physikalische Zwänge stellen gewisse Forderungen an den Integrator:

- Die — i.a. chaotischen — Trajektorien einzelner Teilchen müssen nicht unbedingt möglichst exakt nachgebildet werden. Es reicht, in der Nähe dieser exakten Lösungen zu bleiben.
- Der Zeitschritt sollte möglichst groß wählbar sein, um eine möglichst große Gesamtdauer der Simulation $N\Delta t$ bei einer vorgegebenen Zahl N von Zeitschritten zu erlauben.
- Aus numerischen Gründen (Geschwindigkeit des Algorithmus) sollte die Anzahl der Berechnungen pro Zeitschritt möglichst niedrig sein. Dies gilt in besonderem Maße für die Berechnung der Kräfte.
- Die Zeitumkehrinvarianz der Bewegungsgleichungen (3.2) sollte sich im Algorithmus widerspiegeln, d.h. die Größen $q(t - \Delta t)$ und $q(t + \Delta t)$ sollten symmetrisch vorkommen.¹ Ein solcher Algorithmus wird als **zeitzentriert** bezeichnet.

Man betrachtet die Taylorentwicklung der Ortsfunktion $q(t)$ am Entwicklungspunkt t

$$q(t + \Delta t) = q(t) + \dot{q}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{q}(t)\Delta t^2 \pm \dots \quad (3.7)$$

bzw. für ein negatives Zeitinkrement $-\Delta t$

$$q(t - \Delta t) = q(t) - \dot{q}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{q}(t)\Delta t^2 \mp \dots \quad (3.8)$$

Die Entwicklung wird nach dem quadratischen Glied abgebrochen, dann werden beide Gleichungen addiert. Nach Einsetzen der Newtonschen Gleichung erhält man den **Velocity-Verlet-Algorithmus** [51]

$$q(t + \Delta t) = 2q(t) - q(t - \Delta t) + \Delta t^2 \frac{F(t)}{m} \Delta t^2. \quad (3.9)$$

Das Herausfallen aller ungeraden Potenzen von Δt bedeutet, daß der Fehler des Velocity-Verlet-Algorithmus von der Ordnung Δt^4 ist. Er eignet sich nach TOXVAERD [49] ausgezeichnet² für Molekulardynamik-Simulationen, besitzt jedoch zwei Nachteile: Zunächst

¹Gleiches soll natürlich auch für die Impulse gelten.

²TOXVAERD verglich ihn mit den trotz größerer Kompliziertheit weniger geeigneten Gear-Predictor-Korrektor- und Runge-Kutta-Verfahren. Beide folgen zwar der analytischen Lösung der Differentialgleichungen besser, weisen jedoch eine Drift in den berechneten Observablen auf.

ist festzustellen, daß die Geschwindigkeiten in Gleichung (3.9) nicht mehr auftreten. Eine Berechnung über

$$\dot{q}(t) = \frac{q(t + \Delta t) - q(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.10)$$

empfehlte sich nicht, da zum Zeitpunkt t der Wert von q zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ bekannt sein müßte. Des weiteren führt vom numerischen Standpunkt die Addition einer sehr kleinen Größe Δt^2 zu erheblichen Problemen hinsichtlich der Genauigkeit. Beides wird z.B. im **Leap-Frog-Algorithmus** vermieden, der das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} q(t + \Delta t) &= q(t) + \frac{\Delta t}{m} p(t + \Delta t/2) \\ p(t + \Delta t/2) &= p(t - \Delta t/2) + \Delta t F(t) \end{aligned} \quad (3.11)$$

verwendet. Die Äquivalenz zu Gleichung (3.9) kann durch Elimination von p gezeigt werden. Das explizite Auftreten der Geschwindigkeiten ermöglicht jetzt auch die Behandlung kanonischer Ensembles. Der Nachteil, daß q und p zu versetzten Zeitpunkten berechnet werden, fällt nicht ins Gewicht.

3.3 Kraftberechnung und Potentialmodell

Die potentielle Energie eines Vielteilchensystems läßt sich in Mehrteilchenwechselwirkungen aufteilen und sortieren:

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = V_0 + \sum_{i=1}^N \Phi_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \Phi_{ij} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \sum_{k=j+1}^N \Phi_{ijk} + \dots \quad (3.12)$$

Dabei bedeutet z.B. $\Phi_{ij} = \Phi_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ und wird als **Zweikörperpotential** beziehungsweise **Paarpotential** bezeichnet, analog Φ_{ijk} als **Dreikörperpotential**.

In der vorliegenden Arbeit wurden nur zentralsymmetrische Paarpotentiale $\Phi_{ij}(r_{ij}) = \Phi_{ij}(|r_i - r_j|)$ verwendet, wobei i, j eine Abzählung der beteiligten Teilchen bedeuten. Damit ergibt sich die gesamte potentielle Energie einer Konfiguration durch zweifache Summation über alle Teilchen:

$$V = \sum_i V_i = \sum_i \sum_{j>i} \Phi_{ij}(r_{ij}). \quad (3.13)$$

Die Kraftberechnung wird für jedes Teilchen i separat ausgeführt, man erhält

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij} = - \sum_{j \neq i} \nabla \Phi_{ij}(r_{ij}) \quad (3.14)$$

wobei das 3. Newtonsche Axiom ($\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}$) ausgenutzt werden kann, so daß sich der Aufwand halbiert. Trotzdem müssen bei N Teilchen $\frac{1}{2}N(N-1)$ Potentialwerte und Kräfte

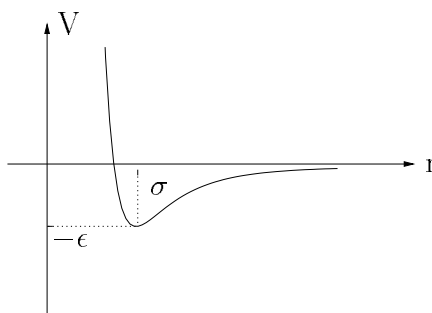


Abbildung 3.1: Lennard-Jones-Potential.

Atomsorten	Potentialtiefe ϵ	Potentialradius σ
AA	1	1,054
AB	2	1,230
BB	1	1,204

Tabelle 3.1: Potentialparameter.

berechnet werden, ein in der Teilchenzahl quadratischer Aufwand, der allenfalls bei kleinen Teilchenzahlen vertretbar ist. Die meisten Potentiale klingen für große r_{ij} jedoch stark ab, so daß das Potential oberhalb eines bestimmten Wertes r_c ohne großen Fehler abgeschnitten, d.h. gleich null gesetzt werden kann. Dieser wird als **cut-off-Radius** bezeichnet.

Damit erstrecken sich die Summationen in j lediglich über die **Nachbarn** von r , d.h. jene Teilchen, deren Abstand zum Teilchen i kleiner ist als r_c . Sei deren Anzahl N_c , dann wird der Aufwand zur Potential- und Kraftberechnung $\frac{1}{2}NN_c$, also linear in der Teilchenzahl. Praktisch geht man so vor, daß für jedes Teilchen eine **Nachbarliste** angelegt wird.

In dieser Arbeit wurde das zentralsymmetrische **Lennard-Jones-Potential**

$$\Phi_{ij}(r_{ij}) = \epsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (3.15)$$

verwendet, das zur Beschreibung von Edelgaskristallen entwickelt wurde. Deren gebundener Zustand beruht auf einer schwachen anziehenden Dipol-Dipol-Wechselwirkung proportional zur inversen sechsten Potenz des Abstandes. Der abstoßende Term hat seine Ursache in der Pauli-Abstoßung der Elektronenschalen. An ihn wird lediglich die Forderung gestellt, für kleine Abstände r den attraktiven Term dominieren. Aus rechentechnischen Gründen wird meist die inverse zwölfte Potenz des Abstandes verwendet.

Die **Potentialparameter** ϵ und σ werden als **Potentialtiefe** bzw. als **Potentialreichweite** bezeichnet. Man erhält dadurch ein natürliches Einheitensystem: Längen werden in σ und Energien in ϵ gemessen. V hat sein Minimum von $-\epsilon$ gerade bei σ . Für die Simulationen wird $V(r)$ bei r_c abgeschnitten und um $V(r_c)$ nach oben verschoben (Abb.

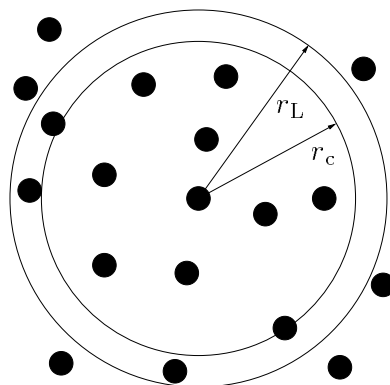


Abbildung 3.2: Zur Verwendung von Nachbarlisten: Vergrößerung des Sphärenradius von r_c auf r_L .

3.1), damit seine Stetigkeit gewährleistet ist. Da das in dieser Arbeit untersuchte Quasikristallmodell aus zwei verschiedenen Atomen A und B besteht, wurden drei verschiedene Potentialfunktionen V_{AA} , V_{AB} und V_{BB} verwendet. Die jeweiligen Parameter finden sich in Tabelle 3.1.

3.4 Nachbarlisten und der Link-Cell-Algorithmus

Zwar hat man den Aufwand bei der Potential- und Kräfteberechnung durch die Beschränkung auf die Nachbarn eines Teilchens linear in der Teilchenzahl gemacht, das eigentliche Problem wurde jedoch nur verschoben, da die Nachbarlistenberechnung quadratisch mit der Teilchenzahl wächst. Es werden zwei Methoden angewandt, die diesen Aufwand reduzieren. Zunächst ist festzustellen, daß sich in Festkörpern die Nachbarschaftsverhältnisse innerhalb eines Zeitschrittes kaum ändern. Es ist also nicht sinnvoll, die Nachbarlisten in jedem Zeitschritt neu zu berechnen.

Statt dessen vergrößert man die Nachbarlisten, in dem man alle Teilchen aufnimmt, die sich innerhalb einer Sphäre mit Radius r_L befinden, wobei r_L um einen kleinen Betrag größer als r_c gewählt wird, wie in Abb. 3.2 gezeigt. Diese Nachbarliste bleibt über mehrere Zeitschritte hinweg gültig und muß erst dann wieder aktualisiert werden, wenn die maximale Entfernung, die von den Teilchen zurückgelegt wurde, die Differenz $r_L - r_c$ überschreitet.

Es bleibt das Problem der eigentlichen Nachbarlistenberechnung. Durch einen **Link-Cell-Algorithmus** ist es möglich, sie mit linearem Aufwand zu berechnen. Dazu werden alle Teilchen in quaderförmige Zellen, deren kleinste Kantenlänge dem Listenradius entspricht, eingeteilt (Abb. 3.3). Die Nachbarn eines Teilchens befinden sich dann allesamt in dessen Zelle oder in den unmittelbar angrenzenden. Es muß allerdings ein erhöhter Speicherbedarf in Kauf genommen werden, da die Nachbarlisten jetzt alle Teilchen innerhalb der kubischen Zelle statt der Sphäre umfassen. Damit stellt der Speicherbedarf eine

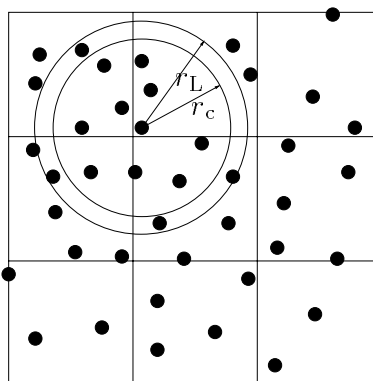


Abbildung 3.3: Link-Cell-Methode: Die Atome werden in quaderförmige (in zwei Dimensionen rechteckige) Zellen eingeteilt. Zur Bestimmung der Nachbarn eines Atoms müssen nur seine eigene Zelle sowie die $3^n - 1$ Nachbarzellen durchsucht werden. n bedeutet hierbei die Raumdimension.

obere Grenze für Molekulardynamiksimulationen dar.

3.5 Ränder

Die Ränder haben in molekulardynamischen Rechnungen einen großen Einfluß auf die Ergebnisse. Eine einfache Überlegung mag dies verdeutlichen: Ein Würfel der Kantenlänge a besitzt ein Verhältnis von Randfläche zu Volumen von $\frac{6a^2}{a^3} = \frac{6}{a}$. Bei herkömmlichen Kristallproben, bei denen a etwa 10^{10} Gitterkonstanten beträgt, ist dieses Verhältnis verschwindend gering, ebenso der Einfluß der Randatome auf das Verhalten der Probe. Bei den derzeitigen Probengrößen in der Molekulardynamik³ ist der Einfluß der freien Ränder ungleich höher. Prinzipiell existieren drei verschiedene Methoden, die Ränder zu behandeln, die jeweils spezifische Vor- und Nachteile besitzen.

- **periodische Ränder:** Durch periodische Ränder wird das Problem der Oberflächen elegant vermieden. Die Probe wird in die jeweilige Richtung periodisch fortgesetzt, d.h. es wird eine identische Kopie an den Rand angefügt. Im allgemeinen spielt die so erzeugte künstliche Periodizität bei genügender Probengröße keine Rolle mehr. Das Verfahren ist jedoch zur Behandlung bestimmter Konfigurationen nicht geeignet, z.B. bei eingebauten Versetzungen oder bei Rissen.
- **freie Ränder:** Dies ist die einfachste Methode. Die Atome am Rand besitzen im Mittel nur halb so viele Nachbarn wie jene im Probeninneren und besitzen eine unterschiedliche potentielle Energie. Bei großen Deformationen kann es passieren, daß

³In dieser Arbeit entspricht a etwa 10^2 Gitterkonstanten, der aktuelle Molekulardynamik-Weltrekord liegt eine Größenordnung höher.

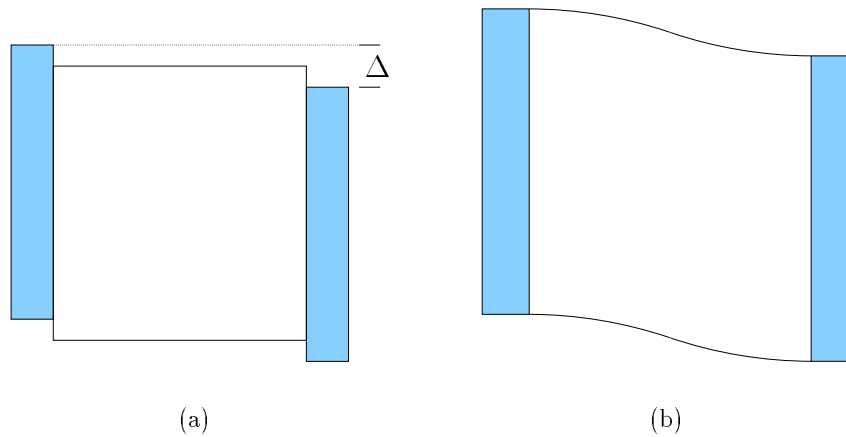


Abbildung 3.4: Durchführung eines Scherschnittes: Verschiebung um das Scherinkrement Δ und anschließende Relaxation.

solche Randatome abdampfen, d.h. den Kontakt zur Probe verlieren, und störenden Einfluß auf die Simulation nehmen.

- **feste Ränder:** Damit das eben beschriebene Abdampfen von Atomen verhindert wird, bietet es sich an, die Randatome unbeweglich zu machen. Man hält sämtliche Atome fest, deren Abstand zur Oberfläche geringer ist als der Cut-off-Radius des Potentials. Dadurch spürt keines der inneren, beweglichen Atome den Einfluß des Randes. Mit dieser Methode können auch Oberflächenkräfte simuliert werden. Ein Nachteil dieses Vorgehens besteht darin, daß sie keine unmittelbare physikalische Rechtfertigung besitzt.

In dieser Arbeit wurden je nach Anforderungen alle drei Arten von Rändern verwendet.

3.6 Durchführen einer Schersimulation

Bei der Untersuchung von Scherdeformationen interessiert die resultierende Atomanordnung. Dazu führt man an der Probe eine geometrische Operation durch, die als ein geeignetes Modell einer Scherdeformation angesehen werden kann. Anschließend bewegen sich die Atome frei unter dem Einfluß ihrer gegenseitigen Wechselwirkung bis sie einen Zustand minimaler potentieller Energie erreicht haben. Dies wird als **Relaxation** der Probe bezeichnet. Gleiches gilt für den Einbau einer Versetzung in die Probe, der ebenfalls rein geometrisch durch Aufbringen des Verschiebungsfeldes nach Gleichung (2.19) vonstatten geht. Die entstandene Konfiguration befindet sich sicherlich nicht in einem Zustand minimaler potentieller Energie und wird in mehreren Schritten relaxiert⁴.

⁴Sogar die direkt mit der Gridmethode erzeugte Ausgangskonfiguration befindet sich noch nicht völlig in einem Minimum der potentiellen Energie und muß zunächst relaxiert werden.

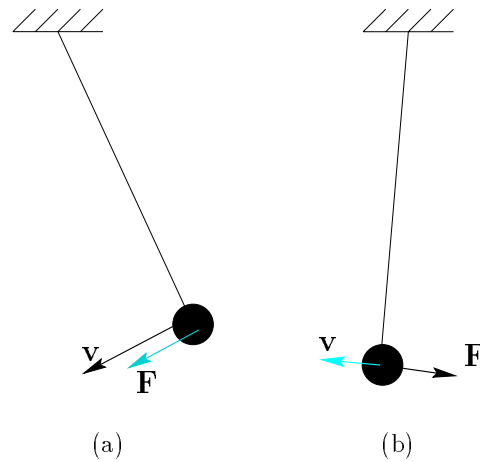


Abbildung 3.5: Zur Mikrokonvergenz: Bewegungen aus einem Potentialminimums heraus (b) werden weggedämpft.

Zur geometrischen Modellierung einer Schersimulation bieten sich verschiedene Vorgehensweisen an. Der Probe kann zu Anfang ein homogenes Verschiebungsfeld aufgeprägt werden, anschließend wird eine Relaxation durchgeführt. Die Scherung kann auch kontinuierlich in kleinen Schritten erfolge,; Scherung und Relaxation finden dann parallel statt. Letztere Methode wurde in dieser Arbeit jedoch nicht angewandt.

Ein grundsätzlich anderes Verfahren ist in Abb. 3.4 dargestellt. Die Probe wird in ein Inneres (Bulk) und zwei schmale Randstreifen, die ca. 3 % der Probenausdehnung ausmachen, unterteilt. Die beiden Randstreifen werden in verschiedene Richtungen um das **Scherinkrement** Δ verschoben. Dies stellt ohne Zweifel keinen Gleichgewichtszustand der Konfiguration dar. Daher wird anschließend eine Relaxation durchgeführt, bis ein Minimum der potentiellen Energie erreicht ist. Ist dies der Fall, wird eine neuerliche Verschiebung vorgenommen.

Mittels einer Modifikation der Dynamik kann dieser Prozeß beschleunigt werden. Dazu wird in jedem Zeitschritt das Skalarprodukt von Geschwindigkeit und Kraft für jedes Atom gebildet. Ist dieses gleich null, so wird die Geschwindigkeit ebenfalls gleich null gesetzt. Dieses ständige Entziehen von kinetischer Energie entspricht einer Abkühlung des Systems auf die Temperatur null. Hat die kinetische Energie einen Schwellenwert unterschritten, so wird die Relaxation beendet und ein neuerlicher Scherschritt durchgeführt.

Für ein einkomponentiges, eindimensionales System (Fadenpendel) ist diese Methode, die als **Mikrokonvergenz** bezeichnet wird, in Abb. 3.5 veranschaulicht. Dabei ist die Relaxation beendet, wenn die mittlere kinetische Energie pro Atom einen vorgegebenen Schwellenwert unterschreitet. Zu Beginn der Relaxation ruhen alle Atome und beginnen sich erst allmählich aufgrund der wirkenden Kräfte zu bewegen. Um diesen Prozeß zu beschleunigen, wird jedes Atom mit einem Betrag kinetischer Energie versehen, der aus einer Maxwell-Verteilung der Geschwindigkeiten berechnet wird.

3.7 Detektion der Defektstruktur

Anders als in zwei Dimensionen ist die direkte Beobachtung der Versetzung durch Betrachten der Atomkonfiguration praktisch nicht mehr möglich, da die Anzahl der Atome in jede Betrachtungsrichtung schlichtweg zu groß ist. Zwar kann durch eine Projektion in Versetzungslinienrichtung eine Gleit- oder Kletterbewegung festgestellt werden. Der Verlauf der Versetzungslinie *in der Gleitebene* ist jedoch nicht zugänglich. Es ist insbesondere unmöglich zu entscheiden, ob sie sich gradlinig oder durch Kinkenbildung durch den Quasikristall bewegt. Des weiteren verschlechtert sich die Auflösung mit zunehmender Probengröße.

In [15] wurde die Konfiguration entlang einer geeigneten Achse — meist einer Drehsymmetrieachse — in die Zeichenebene projiziert. Betrachtete man das erhaltene Bild unter einem kleinen Winkel zur Zeichenebene, erkannte man verschiedene Ebenenstrukturen und die Versetzung äußerte sich in Form einer zusätzlichen Halbebene, deren Gleit- und Kletterbewegung genauer als in der einfachen Seitenansicht verfolgt werden kann.

Indem Burgersumläufe in der Konfiguration sowie einer Referenzkonfiguration durchgeführt wurden, konnten die lokalen Burgersvektoren sowie im Prinzip auch der Verlauf der Versetzungslinie *in der Gleitebene* bestimmt werden. Praktisch war letzterer aber nicht zugänglich, Ursache war die zu geringe Anzahl tatsächlich durchführbarer Burgersumläufe.

In dieser Arbeit wurde ein auf ZHOU [58] zurückgehendes Verfahren zur Visualisierung von Versetzungskernen in dreidimensionalen fcc-Kristallen benutzt. Die Identifikation der im Kern befindlichen Atome erfolgte dort über ihre erhöhte potentielle Energie, es wurden nur die Atome innerhalb eines entsprechenden Energiefensters abgebildet.

In Quasikristallen mit eingebauter Versetzung ist dieses Verfahren nicht ohne weiteres anwendbar, da sich aus der großen Zahl lokal unterschiedlicher Atomumgebungen schon in der versetzungsfreien Konfiguration stark unterschiedliche potentielle Energien ergeben. Durch Betrachten der Energiedifferenz beider Konfigurationen gelingt jedoch eine vergleichbare Visualisierung. Im Unterschied zu ZHOU fcc-Kristallen sieht man allerdings nicht nur den Versetzungskern, sondern auch den Stapelfehler, den die Versetzung beim Durchlaufen erzeugt hat.

Kapitel 4

Gamma-Oberflächen-Berechnungen

4.1 Vorgehensweise

Zur Berechnung der Gamma-Oberfläche wurde der quasikristalline Approximant entlang einer Ebene normal zu einer Drehsymmetrieachse, die im folgenden als z -Achse bezeichnet wird, aufgeschnitten und die beiden Hälften um einen in der Schnittebene liegenden Vektor \mathbf{r} starr verschoben (Abb. 4.1). Die x - und y -Achse wurden parallel zu den Approximantenkanten gelegt und die Verschiebung in Polarkoordinaten (r, ϕ) dargestellt. Das Ergebnis ist die Fehlpassungsenergie $E = E(r, \phi)$. E wurde auf seinen Wert im Ursprung $E(0, 0)$ normiert.

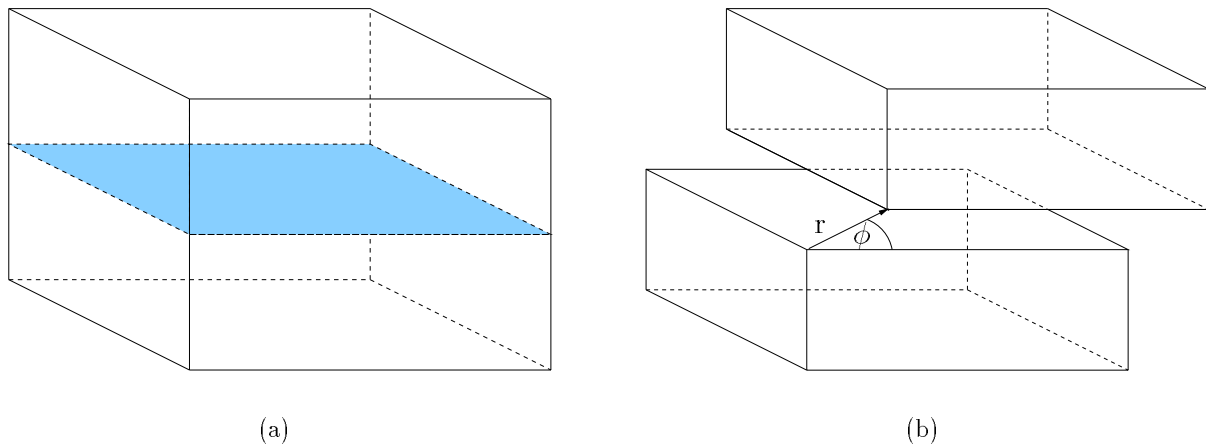


Abbildung 4.1: Zur Vorgehensweise bei der Gamma-Oberflächen-Berechnung.

Richtung senkrecht	Approximation			Länge in	Atom- anzahl
	x -Achse	y -Achse	z -Achse	x -Richtung	
zweizählig	3/2	3/2	3/2	14,414	2887
dreizählig	3/2	3/2	1/3	24,965	5354
fünzfählig	3/2	3/2	2/5	27,416	7222

Tabelle 4.1: Zu den verwendeten Approximanten.

4.2 Ergebnisse

Die Gamma-Oberflächen wurden normal zu einer zwei-, drei- und fünfzähligen Drehsymmetrieachse berechnet. Dazu wurden die Approximanten aus Tabelle 4.1 verwendet. Es war für die x - und y -Achse sowie die z -Achse im zweizähligen Fall jeweils τ zu approximieren, für die z -Achse im dreizähligen Fall $\frac{1}{\tau^2}$ und im fünfzähligen Fall $\frac{1}{\sqrt{5}}$.

In Abb. 4.2 sind die Gamma-Oberflächen für die zwischen Quasikristallebenen größtmöglichen Abstandes gelegenen Gleitebenen normal zur zwei-, drei- und fünfzähligen Richtung abgebildet. Dabei wurde mit dem Winkel ϕ in 360 Schritten der gesamte Vollkreis abgestrichen, der Radius r wurde für jeden Winkel in 300 Schritten von 0 bis 1,2·Länge des Approximanten gewählt.

Deutlich sind die entsprechenden Drehsymmetrien zu erkennen. Des weiteren fallen Spiegelachsen ins Auge, und zwar n Stück für eine n -zählige Drehachse. Dies erklärt sich aus den Symmetrieeigenschaften des Ikosaeders, der senkrecht zu einer n -zähligen Drehachse \mathbf{d} n zweizählige Drehachsen besitzt. Betrachtet man lediglich eine Ebene normal zu \mathbf{d} , z.B. die Gamma-Oberfläche, so zeigt diese die beobachtete Achsensymmetrie zu den zweizähligen Drehachsen. Diese zweizähligen Achsen sind im oberen Teil von Abb. 4.2 an den Symmetriekosaedern veranschaulicht.

Abb. 4.4 zeigt alle zwölf auftretenden Gamma-Oberflächen. Der Radius wurde wie oben variiert, der Winkel nur über einen Teilbereich von 0° bis 90° für eine zweizählige, von 0° bis 120° für eine dreizählige und von 0° bis 72° für eine fünfzählige Gleitebene. Abb. 4.3 zeigt die lokalen Minima für Verschiebungen, die betragsmäßig kleiner als 3 sind, für die Gleitebenen zwischen Quasikristallebenen größten Abstandes. In den Tabellen 4.2, 4.3 und 4.4 sind die zugehörigen Daten aufgeführt.

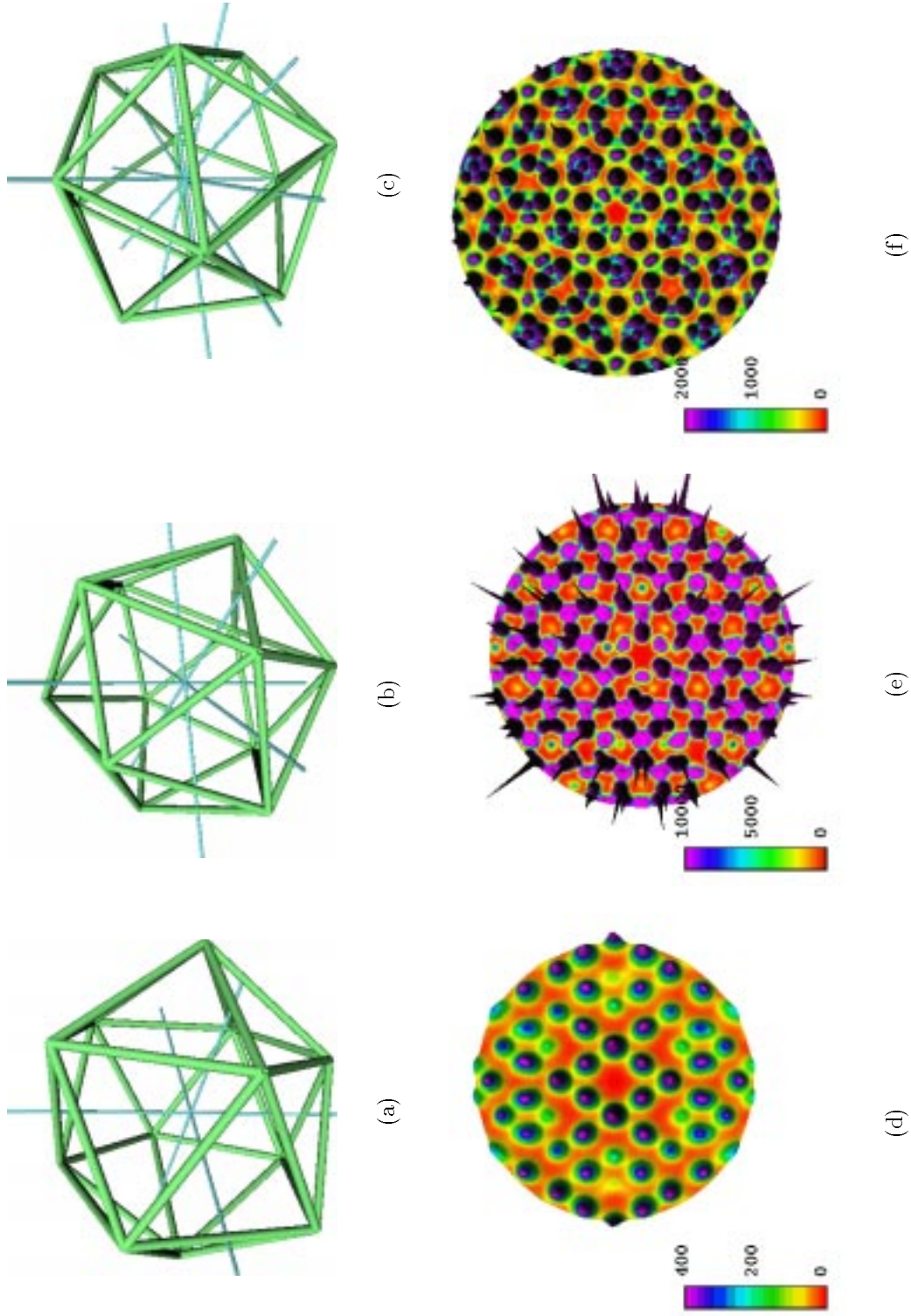


Abbildung 4.2: Gamma-Oberflächen für die größtmöglichen Abstände in zwei-, drei- und fünfzählige Richtung. Darüber sind die Symmetriekosaeder mit den in der Gleitebene liegenden zweizähligen Achsen dargestellt.

Nummmer	Winkel	Radius	Potentielle Energie
1	0	1,76	15,56
2	17	1,48	63,40
3	33	1,30	39,22
4	54	1,71	9,29
5	77	1,38	79,61
6	90	1,10	48,38
7	90	2,35	27,12

Tabelle 4.2: Minima der Gamma-Oberfläche für die zweizählige Richtung.

Nummmer	Winkel	Radius	Potentielle Energie
1	21	1,70	251,15
2	29	1,40	291,53
3	31	1,40	330,77
4	56	1,75	190,39

Tabelle 4.3: Minima der Gamma-Oberfläche für die dreizählige Richtung.

Nummmer	Winkel	Radius	Potentielle Energie
1	0	1,26	1204,13
2	0	2,41	315,13
3	19	2,06	94,96
4	36	1,89	300,99

Tabelle 4.4: Minima der Gamma-Oberfläche für die fünfzählige Richtung.

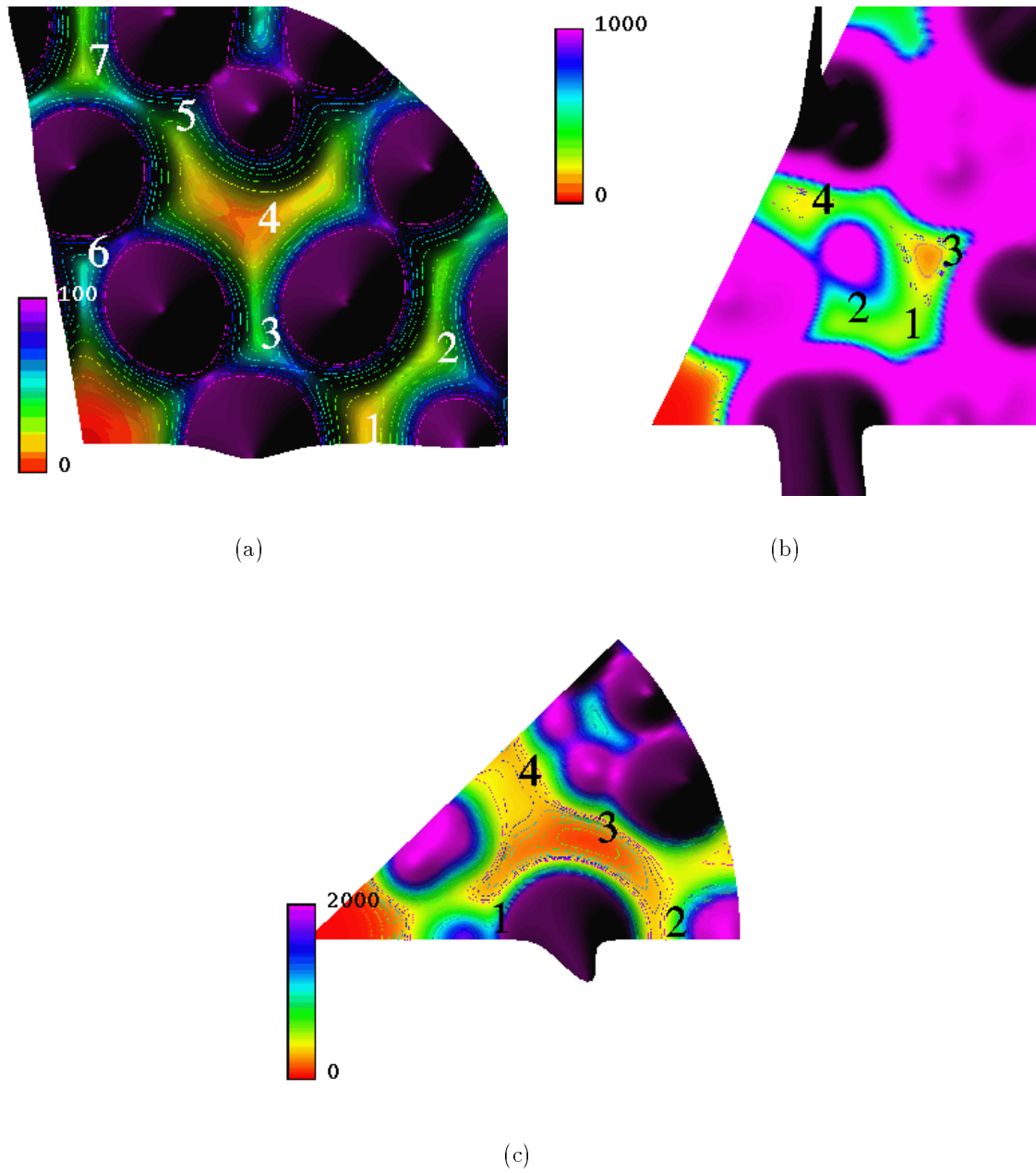


Abbildung 4.3: Übersicht über die dem Ursprung nächsten Minima der Gammaoberfläche der zwei- (a), drei- (b) und fünfzähligen Gleitebene.

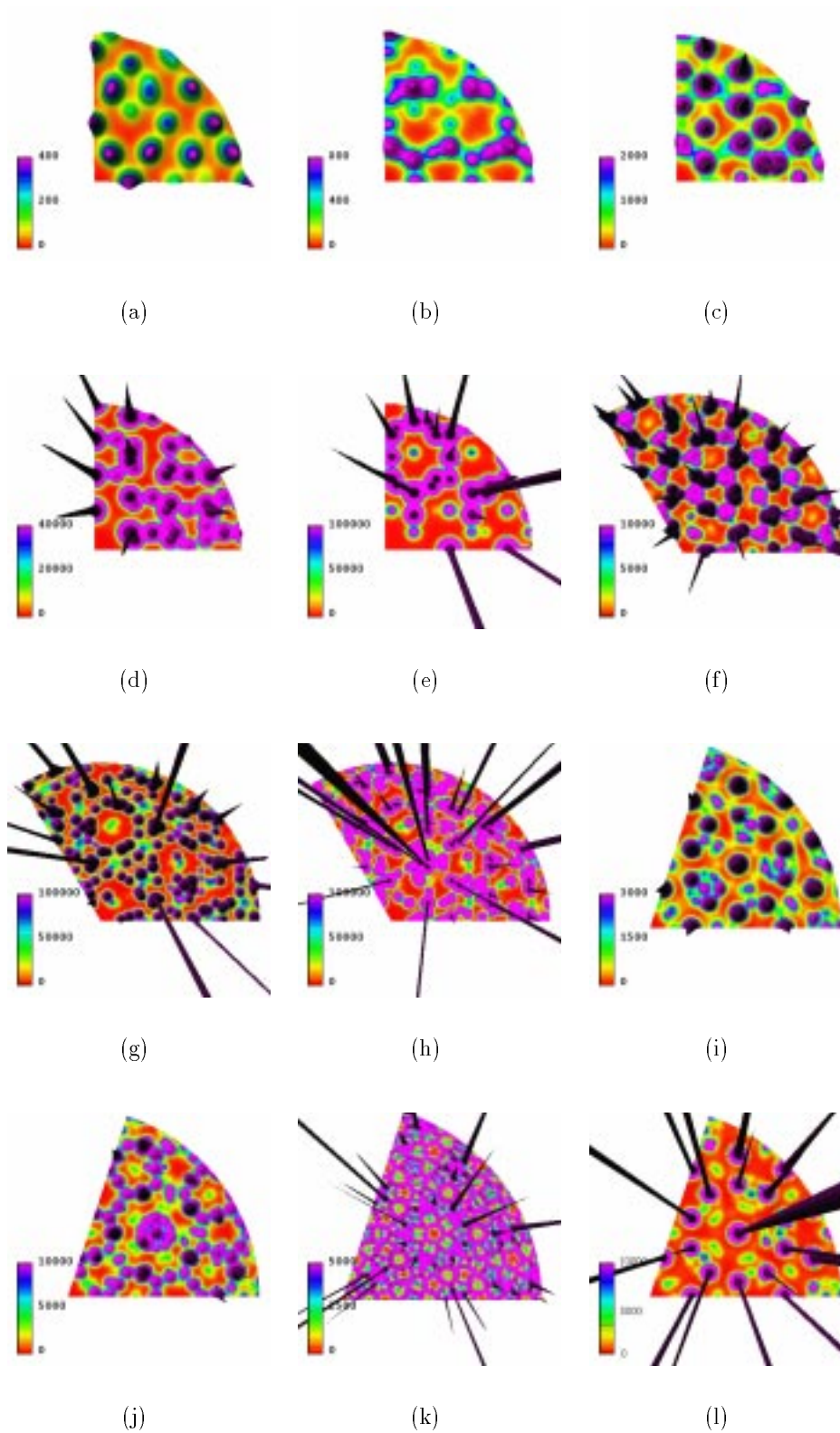


Abbildung 4.4: Gamma-Oberflächen in der Reihenfolge: zweizählig, dreizählig, fünfzählig; innerhalb dieser Gruppen nach absteigendem Ebenenabstand geordnet.

4.3 Diskussion

Wie man erkennt, liegen die niedrigsten Minima der Gamma-Oberfläche in der zweizähligen Ebene bei einem Ebenenabstand von 0,650 und sind in der Größenordnung von etwa 12 % der Bindungsenergie. Dies ist nicht überraschend, da dort der größte Abstand benachbarter Ebenen auftritt. Es ist noch zu berücksichtigen, daß die erhaltenen Werte nicht direkt den günstigsten Burgersvektoren entsprechen, da bei einer Relaxation der hier verwendeten Approximanten sich die Bindungslängen um 3 % ausdehnten. Da die Gamma-Oberflächen aus einer starren Verschiebung der Atome berechnet wurden, sind alle Längen somit um 3 % zu vergrößern.

Als Burgersvektoren einer einzubauenden Versetzung boten sich die Minima in die 0° - und die 90° -Richtung an. Für andere Winkel würde die Versetzungslinie die Seitenflächen nicht unter einem rechten Winkel schneiden, was der Stabilität abträglich wäre. Eine Alternative wäre die Konstruktion von Proben deren Seitenflächen parallel zu solchen Winkeln wären, dies wurde im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht durchgeführt. Des weiteren erwies sich das flache Minimum mit $\phi = 90^\circ$ und $r = 1,10$ als ungeeignet. Eine Versetzungskonfiguration, die diesen Burgersvektor besaß, erwies sich als metastabil.

Versetzungen für Gleitebenen zu anderen Ebenenabständen oder in andere Richtungen als die zweizählige wurden nicht untersucht, allerdings wurde ein Versetzungsklettern aus der vorgegebenen Gleitebene größten Ebenenabstandes in eine solche zweitgrößten Ebenenabstandes beobachtet. Anschließend glitt die Versetzung ein Stück in dieser Ebene.

Kapitel 5

Schersimulationen

5.1 Präparation

Um eine möglichst realistische Versetzungskernstruktur zu erhalten, wurden die mit Hilfe des Gridformalismus konstruierten quasikristallinen Approximanten einer umfangreichen Präparation unterzogen. Dazu wurde eine Versetzung in eine zweizählige Gleitebene eingebaut, vor und nach dem Einbau wurde die Probe gründlich relaxiert. Die Versetzung besaß einen Burgersvektor der Länge 1,76, der in x -Richtung zeigte (also $\phi = 0$ aufwies). Im folgenden wird stets ein Koordinatensystem mit x -Achse parallel zum Burgersvektor \mathbf{b} und y -Achse parallel zur Versetzungslinie ξ verwendet. Einheitslänge ist eine Rhomboederkante.

Die Relaxation untergliederte sich in drei Stufen, wobei der Einbau der Versetzung nach der ersten Stufe erfolgte. Im einzelnen wurden folgende Schritte durchgeführt:

- Erste Vorrelaxation des Approximanten über 5000 Zeitschritte à 0,01 Zeiteinheiten.¹ Die Rechnung fand mit periodischen Rändern in alle drei Raumrichtungen statt. Dabei nahm die potentielle Energie pro Atom gegenüber dem unrelaxierten binären ikosaedrischen Modell um 15,8 % auf -12,27 LJ-Einheiten ab (gepunktete Linie in Abb. 5.1). Auch vergrößerte sich der Nächste-Nachbar-Abstand von 1 auf 1,007. Die Längenskala der Gamma-Oberflächen-Berechnungen ist also strenggenommen um dieses Verhältnis zu vergrößern.
- Einbau der Versetzung durch Aufprägen des Verschiebungsfeldes nach PEIERLS-NABARRO. Der Einbau erfolgte ohne die oben beschriebene Skalierung um 1,007; während der folgenden zweiten Relaxation ordneten sich die Atome entsprechend um. Als Gleitebene wurde jedesmal eine Ebene normal zu einer zweizähligen Achse verwendet, letztere wurde als z -Achse gewählt.

Nur in Richtung der Versetzungslinie, die als y -Achse gewählt wurde, wurden periodische Ränder beibehalten. In Richtung des Burgersvektors wurden offene Ränder,

¹Eine Zeiteinheit t_0 entspricht der kürzesten Schwingungsperiode des Systems und kann aus $\sqrt{\frac{m}{\epsilon_{ij}}}$ berechnet werden. Mit den Potentialparametern aus Tabelle 3.1 ergeben sich etwa 10^{-10} Sekunden.

in z -Richtung starre Ränder verwendet, d.h. die Atome, die zur Oberfläche einen Abstand von weniger als $1,1 \cdot r_c$ besaßen, wurden unbeweglich gemacht. Die anfängliche Energie (durchgezogene Linie in Abb. 5.1) lag bei -11,48 LJ-Einheiten pro Atom; dieser erhöhte Wert ist auf die Stapelfehler- und die Versetzungskernenergie zurückzuführen. Nach der Relaxation betrug sie noch -12,08 LJ-Einheiten pro Atom. Der gegenüber der relaxierten Konfiguration vor dem Versetzungseinbau erhöhte Wert ist auf die Versetzungskern- sowie die Stapelfehlerenergie zurückzuführen.

Die Relaxation dauerte insgesamt 20000 Zeitschritte. Dabei wurde die Zeitschrittlänge anfangs auf 10^{-4} Zeiteinheiten gesenkt, da bei höheren Werten die sehr eng benachbarten Atome im Versetzungskern aufgrund ihrer starken gegenseitigen Abstoßung derart hohe Geschwindigkeiten erreichten, daß sie die Probengrenzen durchbrachen.

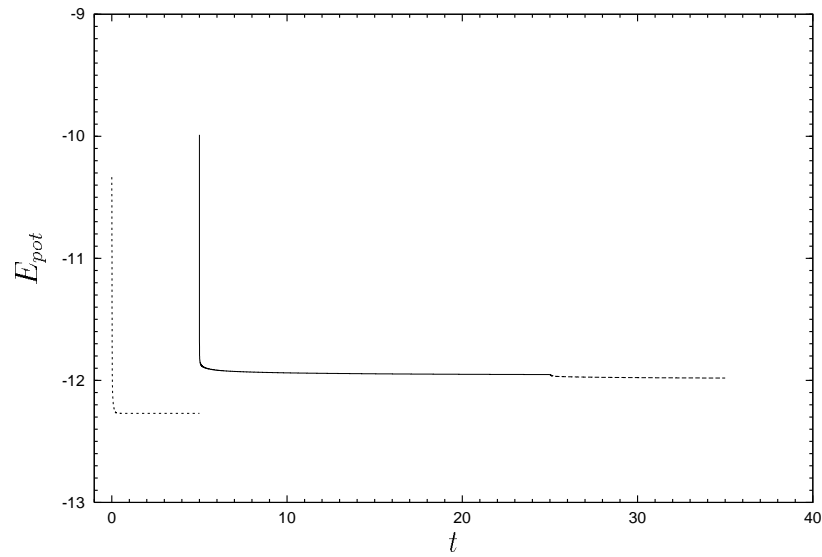
- Eine dritte Relaxation über 10000 Zeitschritte. Dabei wurden in x - und z -Richtung freie und in y -Richtung periodische Ränder verwendet, gleichzeitig wurde eine Zone um die Gleitebene mit einer Dicke von wenigen Ebenenschichten festgehalten. Zwar änderte sich die potentielle Energie (gestrichelte Linie in Abb. 5.1, beginnend bei $t = 25$) nur noch in der Größenordnung von 0,1 %, doch vor allem in dem Gebiet oberhalb des Versetzungskernes änderten einzelne Atome unter Absenkung ihrer potentiellen Energie ihre Position.

Die Kurven der potentiellen Energie legen den Schluß nahe, daß es gelungen ist, die Versetzung zu stabilisieren. Eine Analyse des Verschiebungsfeldes bestätigt diese Überlegungen. In Abb. 5.3 sind das anfangs aufgeprägte Verschiebungsfeld (gepunktete Kurve) nach Gleichung (2.19) mit einer Versetzungsweite von $\zeta = 5$ und einer Burgersvektorlänge von 1,81 abgebildet, dazu das entstandenen Verschiebungsfelder nach beendeter Relaxation (einzelne Punkte). Zunächst fällt der um etwa 3 % vergrößerte Burgersvektor ins Auge. Die Ursache hierfür ist wiederum eine Veränderung des Nächsten-Nachbar-Abstandes, wie aus einer Analyse der Paarverteilungsfunktion hervorgeht (Abb. 5.2).

Die mit der Gridmethode konstruierte Probe hat einen scharfen Peak bei 1 (durchgezogene Kurve), nach der Vorrelaxation verbreitert sich dieser und wandert zu ungefähr 1,007 (gestrichelte Kurve). Die gepunktete Kurve, die nach der zweiten Relaxation berechnet wurde, zeigt ein relativ hohes Nebenmaximum bei 1,031. Keine dieser beiden Skalierungen wurde beim Einbau der Versetzung auf den Burgersvektor angewendet, die zusätzliche Verschiebung der Atome entstand im Laufe der Relaxation von selbst.

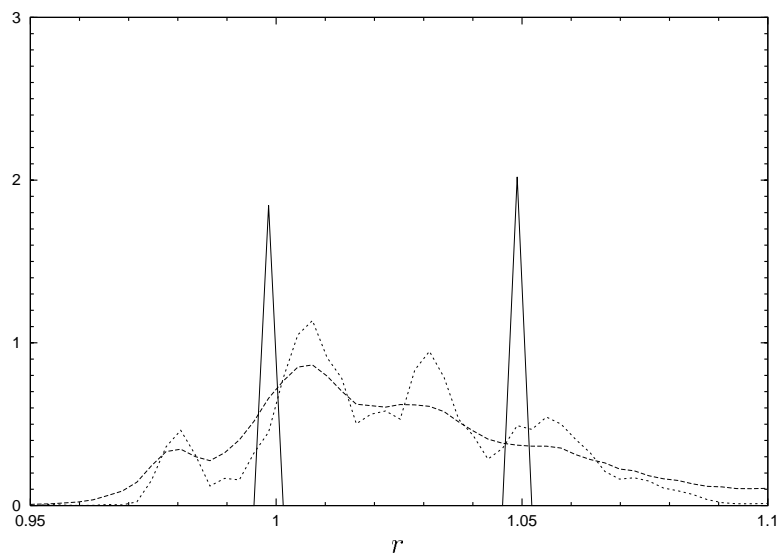
Deutlich ist eine Aufweitung der Versetzung gegenüber dem anfänglich aufgeprägten Verschiebungsfeld zu erkennen. Dieses Verschiebungsfeld wurde mit Hilfe eines Marquardt-Levenberg-Algorithmus durch die PEIERLS-NABARRO-Lösung Gleichung (2.19) approximiert (gestrichelte Kurve in Abb. 5.3). Es ergibt sich eine Versetzungsweite $\xi = 19$.

Die Burgersvektordichte $b'(x) = \frac{\partial u}{\partial x}$ ist in Abb. 5.4 dargestellt. Auch hier bildet die aus der Differentiation der PEIERLS-NABARRO-Lösung erhaltene Lorentz-Kurve eine gute Anpassung an die Daten.



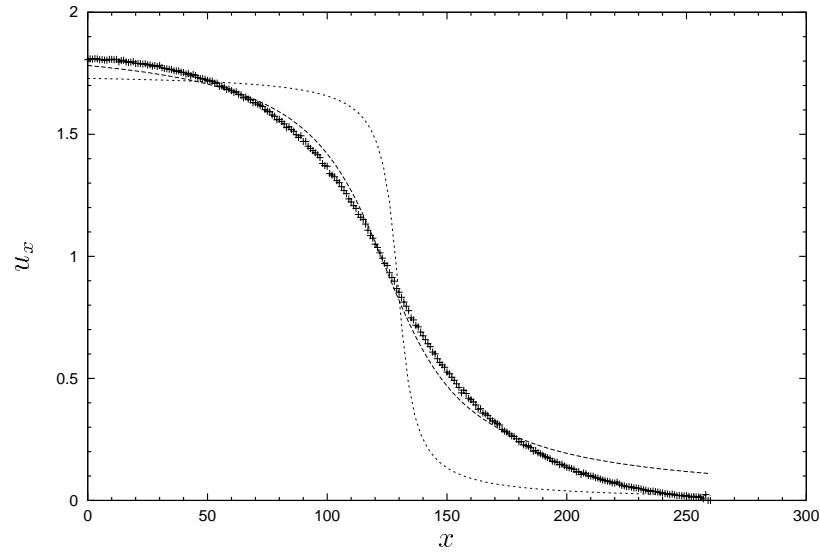
(a)

Abbildung 5.1: Energieverläufe zu verschiedenen Zeitpunkten der Relaxation. Vor Einbau der Versetzung (gepunktete Kurve), nach Einbau der Versetzung mit festen Rändern (durchgezogene Kurve), mit freien Rändern und festgehaltenem Bereich um die Gleitebene (gestrichelte Kurve).



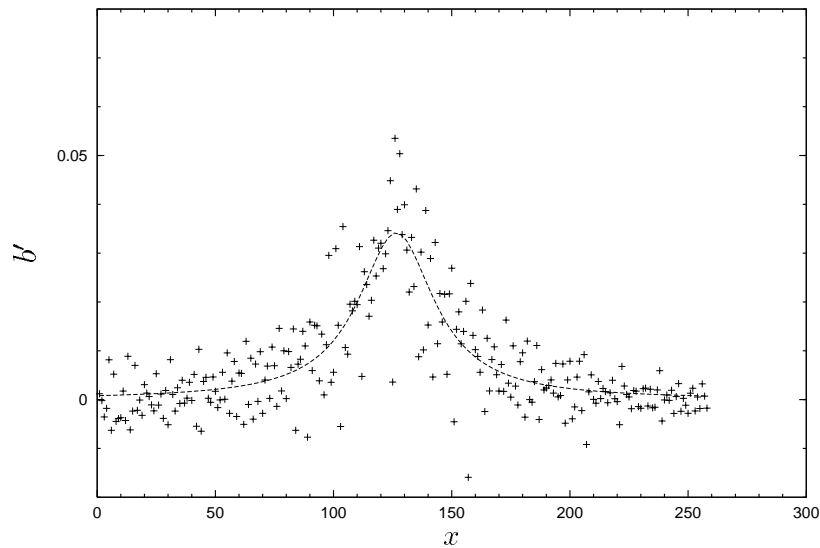
(a)

Abbildung 5.2: Paarverteilungsfunktionen zu verschiedenen Zeitpunkten der Relaxation. Unrelaxiert (durchgezogene Kurve), vorrelaxiert (gestrichelte Kurve), vollständig relaxiert (gepunktete Kurve). Die beiden letzteren Kurven sind um den Faktor 5 überhöht.



(a)

Abbildung 5.3: Verschiebungsfelder während der Relaxation. Eingebautes Verschiebungsfeld: gepunktete Kurve, Verschiebungsfeld in der relaxierten Probe: einzelne Punkte, daran angepaßtes Verschiebungsfeld nach PEIERLS-NABARRO: gestrichelte Kurve.



(a)

Abbildung 5.4: Burgersvektordichte nach erfolgter Relaxation. Eine sich aus der Differentiation der PEIERLS-NABARRO-Lösung ergebende Lorentzkurve wurde an die Daten angepaßt.

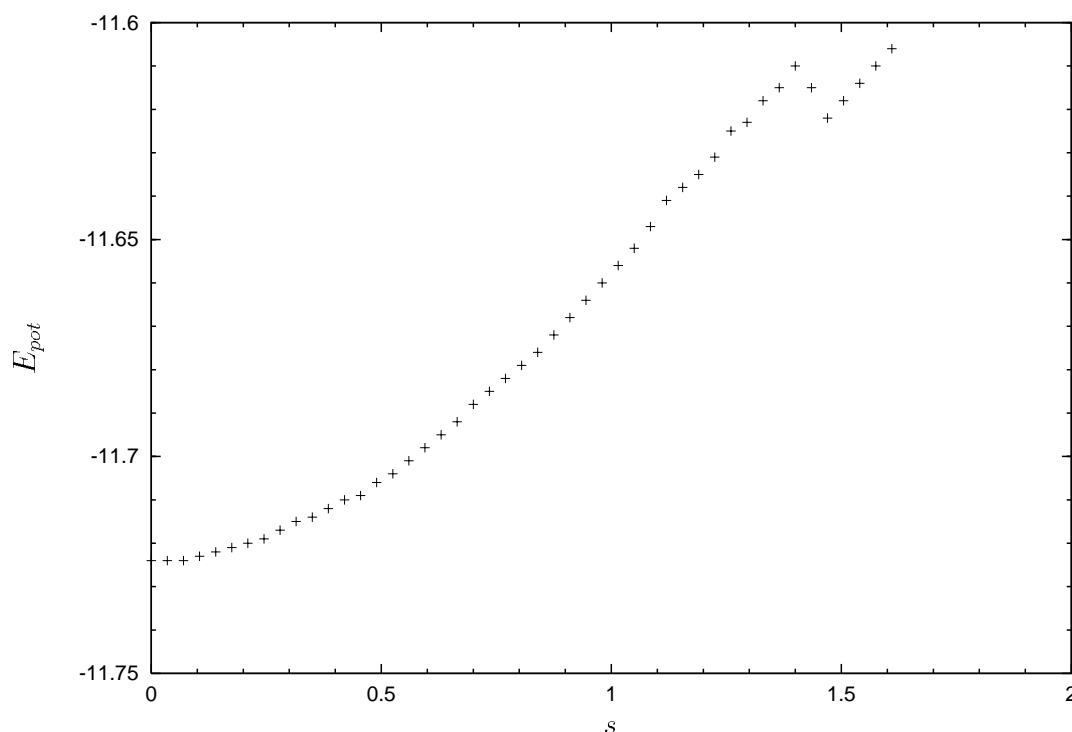


Abbildung 5.5: Energieverlauf bei der inhomogenen Scherung mit Mikrokonvergenz. Aufgetragen ist die potentielle Energie über der Scherweite s .

5.2 Inhomogene Scherung

Ein quasikristalliner Approximant mit 135740 Atomen und den Abmessungen $61,1 \times 61,1 \times 37,7$ wurde wie im vorigen Abschnitt beschrieben vorrelaxiert und mit einer Versetzung versehen. Dann wurde die zweistufige Relaxation an beiden Proben durchgeführt.

Die Konfiguration mit eingebauter Versetzung wurde einer inhomogenen Scherdeformation durch Verschiebung der starren Randblöcke unterzogen; dies geschah unter Anwendung der Mikrokonvergenzmethode. Bei einer Verschiebung von 0,035 pro Schritt ergab sich folgender Verlauf der potentiellen Energie über der Verzerrung (Abb. 5.5): Die Energie zeigte bis zum Verschiebungsschritt 41 in etwa den erwarteten quadratischen Verlauf in der Verzerrung. Der Schubmodul ergab sich durch quadratische Regression zu 78,5. Die Spannung σ zum Verschiebungsschritt 41 berechnete sich zu 0,07, was einem Verhältnis zum Schubmodul von etwa 0,1 % entspricht.

Im Verschiebungsschritt 41 stellt man ein plötzliches Absinken der potentiellen Energie fest. Dies deutet auf eine plastische Verformung durch Bewegung der Versetzung hin.

Um die Versetzung direkt zu visualisieren wurde für jedes Atom der Sorte A die Differenz aus aktueller potentieller Energie am Ende der Relaxation und einem Referenzwert vor dem Einbau der Versetzung gebildet. Indem nur die Atome mit einer Differenz von mehr

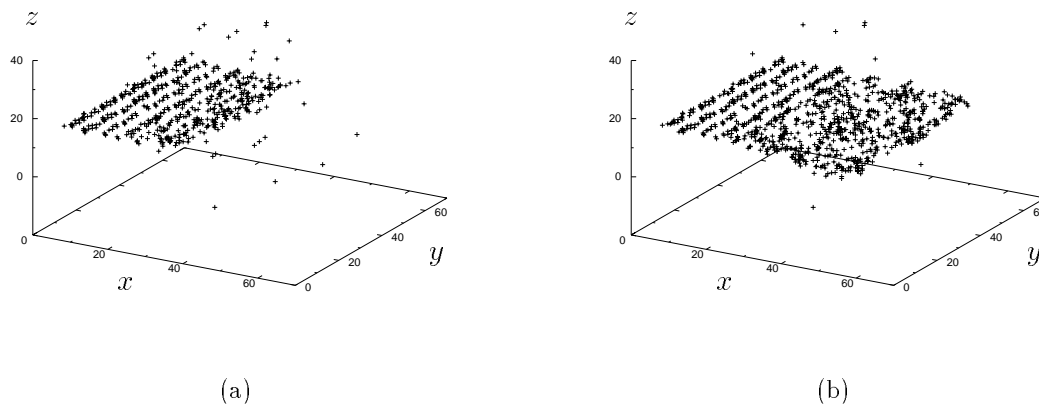
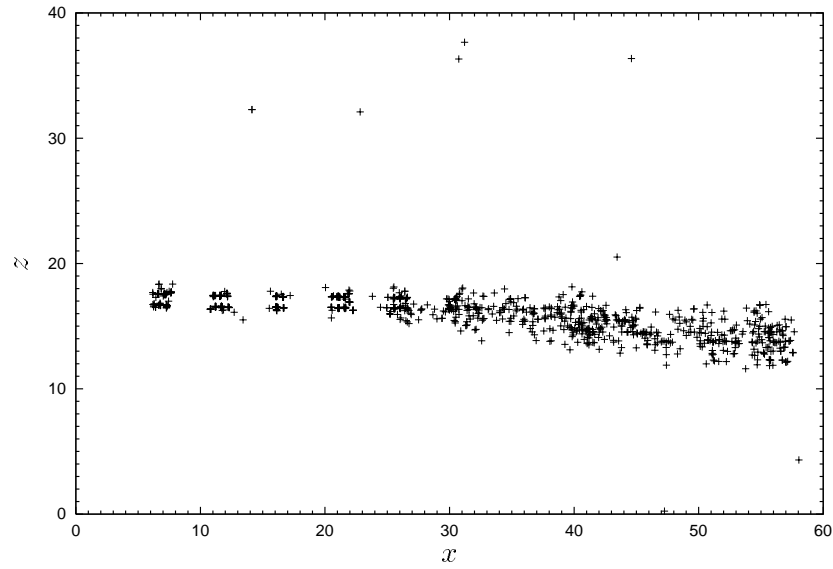


Abbildung 5.6: Gleitbewegung bei der inhomogenen Scherung zu den Zeitschritten 0 und 18000, bezogen auf Scherschritt 41.

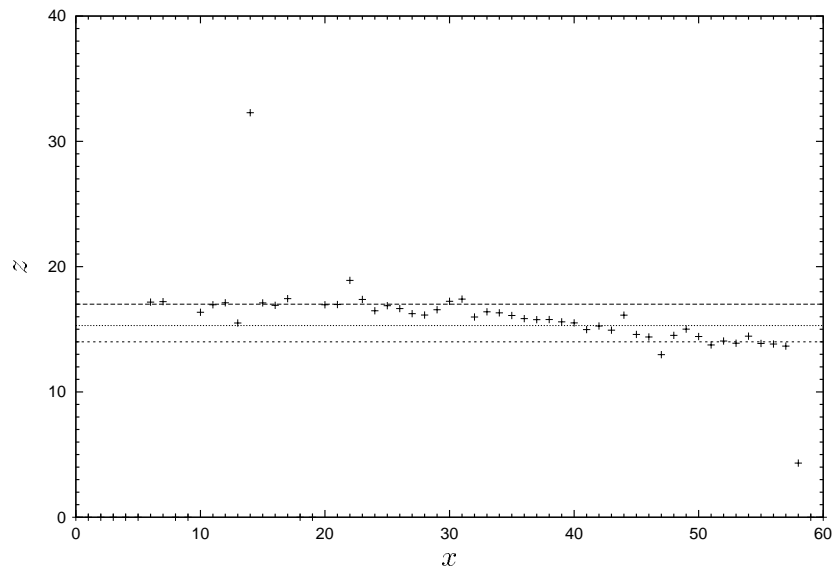
als z.B. 5 LJ-Einheiten als Punkte dargestellt werden, erhält man ein Bild wie Abb. 5.6. Man erkennt den ebenen Stapelfehler, der rechts von der auch in z -Richtung ausgedehnten Versetzungslinie begrenzt wird.

Diese Methode wurde auf verschiedene Konfigurationen zwischen den Scherschritten 41 und 44 angewandt (Abb. 5.6). Dort sind die Zeitschritte 0 und 18000 dargestellt, wobei der Zeitschritt 0 der Konfiguration unmittelbar nach Scherschritt 41 entspricht. Eine Gleitbewegung der Versetzung durch die Probe hindurch hat offenbar stattgefunden.

Die vom Einbau der Versetzung herrührende Stapelfehlerebene ist weiterhin zu sehen. Links von der ursprünglichen Versetzungslinie hat sich ihre ebene Form nicht verändert, auch weisen die abgebildeten Atome weiterhin eine Linienstruktur auf. Indem die Versetzung nach rechts durch die Probe wandert, vergrößert sich die Stapelfehlerebene, deren rechter Rand vom Versetzungskern abgeschlossen wird. In diesem neu hinzugekommenen Bereich ist keine klare Ordnung der Atome mehr zu erkennen.



(a)



(b)

Abbildung 5.7: Analyse der Kletterbewegung bei der inhomogenen Scherung. Blickrichtung entlang der Versetzungslinie. In (b) wurde die z -Koordinate in Intervallen der Länge 1 auf der x -Achse gemittelt.

Des Weiteren ist die Stapelfehlerebene nach unten verbogen, was aus einer Abbildung parallel zur Versetzungslinie wie in Abb. 5.7(a) deutlich hervorgeht. Dies deutet auf eine Kletterkomponente bei der Versetzungsbewegung hin. Um diese näher zu untersuchen wurde die x -Achse in Intervalle der Länge 1 unterteilt und die z -Koordinaten der darin enthaltenen Atome gemittelt. Das Ergebnis ist in Abb. 5.7(b) dargestellt. Zusätzlich sind die Geraden $z = 17$, $z = 15,3$ und $z = 14$ eingezeichnet; diese stellen die ursprüngliche sowie die beiden nächsten unterhalb gelegenen „günstigen“ Gleitebenen dar, d.h. solche größten und zweitgrößten Ebenenabstandes von 0,650 bzw. 0,526. Die Gamma-Oberfläche dieses zweitgrößten Ebenenabstandes weist für den Burgersvektor ebenfalls ein Minimum auf, dieses ist sogar um 12 % niedriger als jenes für den größten Ebenenabstand.

Abb. 5.7(b) kann mit der Vorstellung, daß die Versetzung zwischen den abgebildeten Gleitebenen klettert, dann ein kurzes Stück gleitet und wiederum klettert, erklärt werden. Faßt man die Bewegung der Versetzungslinie hingegen als eine gleichmäßige ebene Abwärtsbewegung auf, so erhält man einen Winkel zwischen dieser Ebene und den zweizähligen Ebenen von etwa 5° . Dies weicht stark von der hinsichtlich des Winkels nächsten Ebene hoher Symmetrie ab: eine dreizählige Ebene unter einem Winkel von $20,9^\circ$. Diese Erklärung für die Bewegung scheidet somit aus.

Die Ursache für die Kletterbewegung selbst könnte in den festen Rändern in z -Richtung liegen. Aufgrund der gewählten Einbaumethode für die Versetzung befindet sich oberhalb der Gleitebene eine Halbebene von Atomen mehr als im unteren Bereich. Die dort befindlichen Atome erfahren daher Kräfte in Richtung der Probenränder in x -Richtung. Dadurch zeigt die Probe die Tendenz, sich zu verbiegen. Diese Annahme konnte mit einer Rechnung an einer Probe, bei der alle Atome frei beweglich waren, gestützt werden: Dort entstand zunächst eine Verbiegung nahe der Versetzungslinie, die sich mit fortschreitender Simulationsdauer ausweitete. Indem bei der Schersimulation die Probe an ihrem oberen und unteren Rand mit festen Rändern versehen wurde, wird zwar diese Verbiegung verhindert. Die wirkenden Spannungen verursachen jedoch eine Kletterkomponente der Versetzungsbewegung.

Auch findet der Gleitanteil der Bewegung keineswegs in Form einer gleichmäßigen Vorwärtsbewegung statt, vielmehr ist deutlich die Ausbildung von Kinkenpaaren zu beobachten. Ein Beispiel bilden die Abbildungen Abb. 5.8, bei denen nur Atome mit einer potentiellen Energiedifferenz größer als 3,6 gezeichnet wurden. Die Bilderabfolge zeigt die Zeitschritte 3800, 4600, 5800 und 6600, wiederum bezogen auf Schersschritt 41. Man erkennt man im Bereich $y \approx 15$ der anfangs relativ geradlinigen Versetzungslinie das Entstehen eines Kinkenpaares, sein Anwachsen in positiver y -Richtung und schließlich seine Rückbildung, während im Bereich $y \approx 48$ eine weiteres entsteht.

Die Ausbildung von Kinken ist keine Überraschung. Aufgrund der Vielzahl lokal unterschiedlicher Atomumgebungen erwartet man ein starkes Pinning der Versetzungslinie an verschiedenen Punkten. Es gelang im Rahmen dieser Arbeit nicht, Gesetzmäßigkeiten im Auftreten der Kinken festzustellen. Die Vermutung, hochkoordinierte atomare Cluster, die der Versetzungsbewegung entgegenstehen, würden auf diese Weise zunächst vermieden, bis die Linienspannung der Versetzung ausreicht, um sie zu zerschneiden, scheint allerdings plausibel.

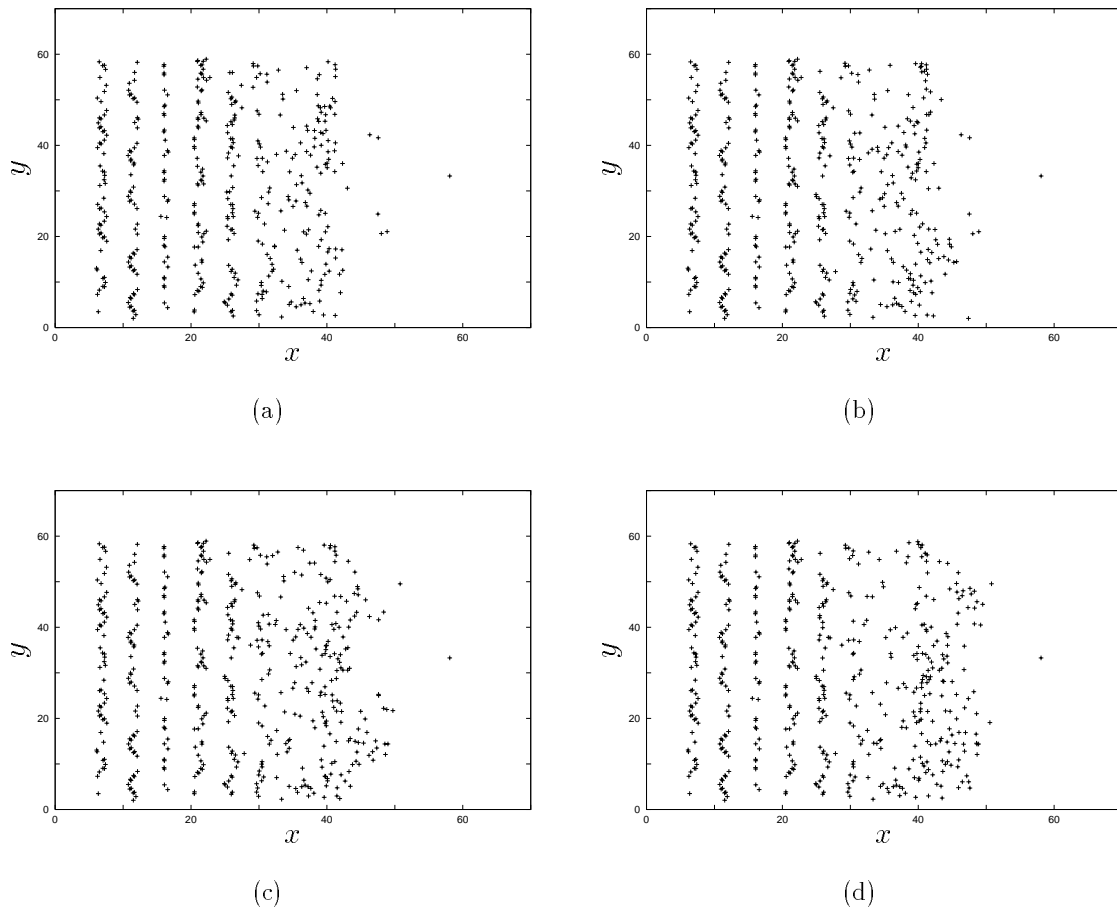


Abbildung 5.8: Gleitbewegung durch Ausbildung von Kinkenpaaren bei der inhomogenen Scherung. Abgebildet sind die Zeitschritte 3800, 4600, 5800 und 6000 bezogen auf Schersschritt 41.

Im Versetzungskern ist ebenfalls keine geordnete Struktur der Atome erkennbar. Während die Stapelfehlerebene jedoch stets eine flächenartige Form aufweist, ist der Versetzungskern eher zylindrisch. Es bleibt noch festzustellen, daß sich durch Darstellen der Atome mit erhöhter potentieller Energiedifferenz die Versetzungslinie und die Stapelfehlerebene nicht getrennt auflösen lassen. Die ihnen zugehörigen Atome besitzen potentielle Energiedifferenzen im gleichen Bereich.

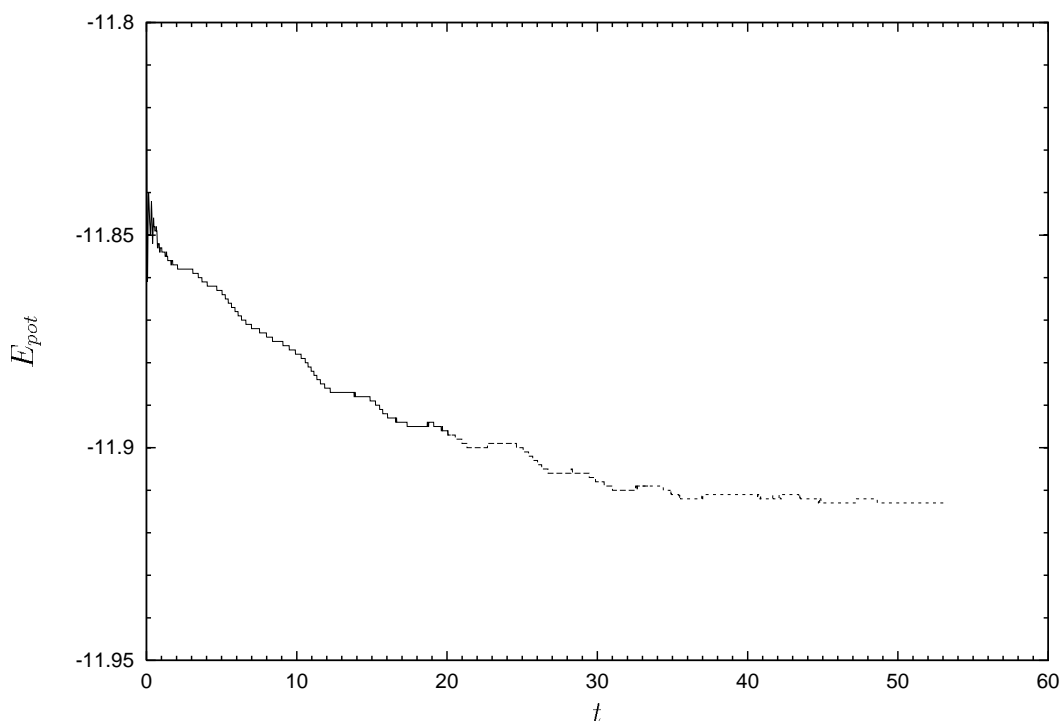


Abbildung 5.9: Energieverlauf bei der homogenen Scherung. Deutlich ist das anfängliche Einschwingen zu erkennen.

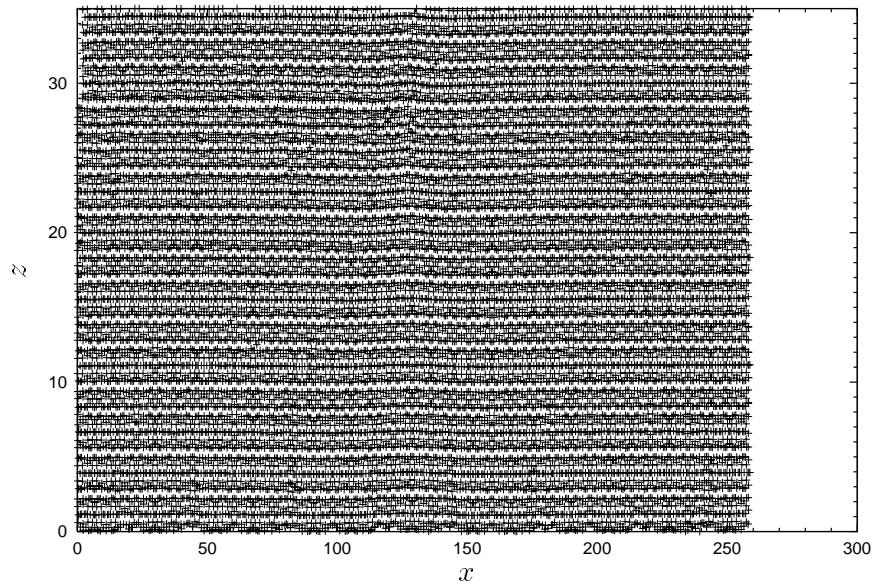
5.3 Homogene Scherung

5.3.1 Allgemeine Bemerkungen

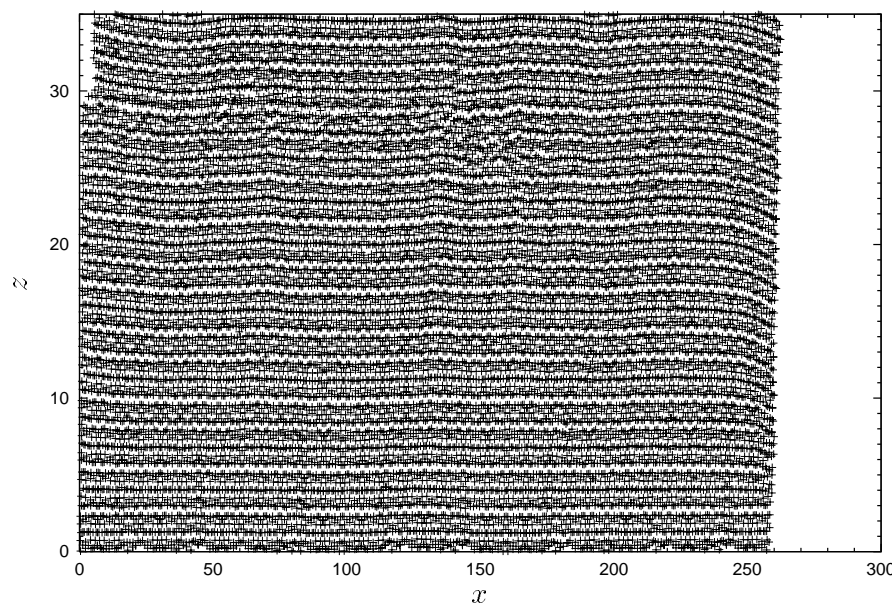
Eine homogene Scherung wurde zunächst mit den beiden 135740 Atome enthaltenden Proben aus durchgeführt. Es stellte sich heraus, daß bis zu einer unrealistisch hohen Verzerrung von 5 % die Versetzung sich nicht bewegte. Ursache hierfür ist die geringe Ausdehnung der Probe normal zur Gleitebene, wo sich die starren Ränder befinden. Dadurch wird das Spannungsfeld der Versetzung stark eingeschränkt, was einen ähnlichen Effekt wie eine Spiegelversetzung hat (vgl. Abschnitt 2.2): Es wirkt eine repulsive Kraft auf die Versetzung, die ihre Gleitbewegung behindert.

Daher wurde eine größere Probe mit 1504080 Atomen wie in Abschnitt 5.1 beschrieben, präpariert und mit einer Versetzung versehen. Die Ausdehnung der Probe betrug $258,6 \times 98,7 \times 61,1$. Sie wurde Scherexperimenten bei verschiedenen Dehnungen im mikrokanonischen Ensemble unterzogen. Dabei konnte oberhalb einer kritischen Verzerrung tatsächlich die Bewegung der Versetzung beobachtet werden. Diese kritische Verzerrung liegt zwischen 2,0 und 2,15 %.

Der Energieverlauf während der Schersimulation ist in Abb. 5.9 wiedergegeben, Nach einem kurzen Einschwingvorgang von etwa 100 Zeitschritten beginnt die Energie deutlich



(a)



(b)

Abbildung 5.10: Konfigurationen bei der homogenen Scherung; Blickrichtung entlang der Versetzungslinie, Zeitschritte 0 und 3300.

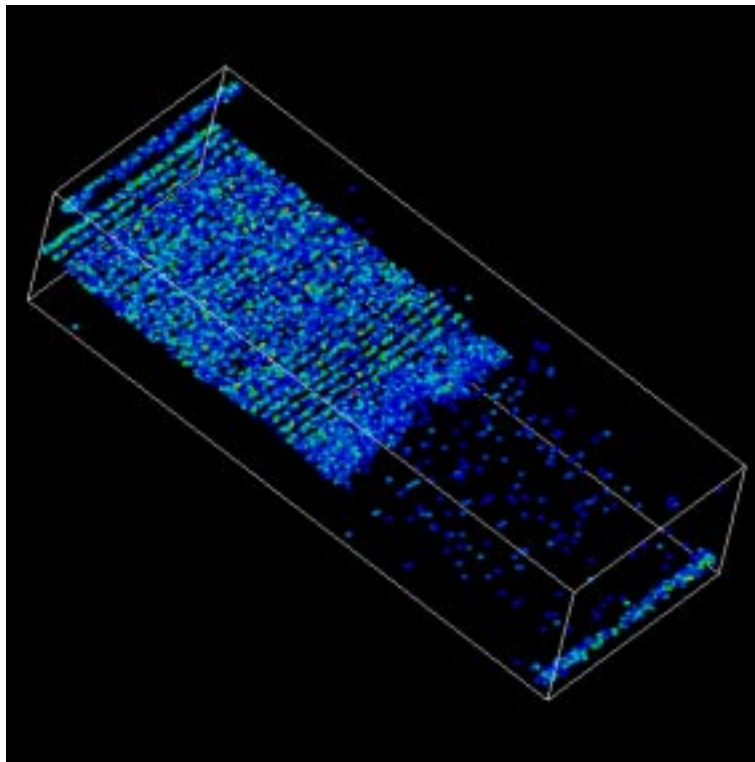


Abbildung 5.11: Zur Visualisierung der Differenz der potentiellen Energie. Die umgebende Box markiert die Probengrenzen.

abzunehmen mit einer Rate von etwa 0,003 LJ-Einheiten pro Zeitschritt. Ungefähr ab Schritt 3300 scheint die Energie sich auf einen konstanten Wert von -11,39 LJ-Einheiten einzupendeln.

Projektionen der Konfigurationen entlang der Versetzungslinie wie Abb. 5.10(a) und 5.10(b), die zu den Zeitschritten 0 und 3300 aufgenommen wurden, und einen Ausschnitt von $z = 0$ bis $z = 35$ wiedergeben, zeigen, daß die Versetzung offenbar nach rechts durch die Probe hindurchgewandert ist. In Versetzungslinienrichtung wurden dabei lediglich Atome aus einem schmalen Bereich der Länge 2 abgebildet, um die Strukturen besser erkennen zu können.

Nach etwa 3300 Zeitschritten hat die Versetzung den rechten Rand der Probe erreicht. Ihre Bewegung durch die Probe besaß offenbar eine Kletterbewegung in negative z -Richtung. Die Ebenen oberhalb der Versetzung sind stark verbogen. Indem man in Gedanken die Konfiguration „geradebiegt“, ist zu erkennen, daß effektiv eine Abgleitung stattgefunden hat. Ob sie hinsichtlich ihres Betrages dem Burgersvektor entspricht, ist damit nicht nachzuprüfen.

Abb. 5.11 zeigt die Atome mit erhöhter differentieller potentieller Energie als Kugeln; diese wurde zusätzlich noch farbkodiert. Dabei bedeuten hellere Farben höhere Energiedifferenzen. Diese Bilder zeigen einen deutlichen Unterschied zur inhomogenen Schersimula-

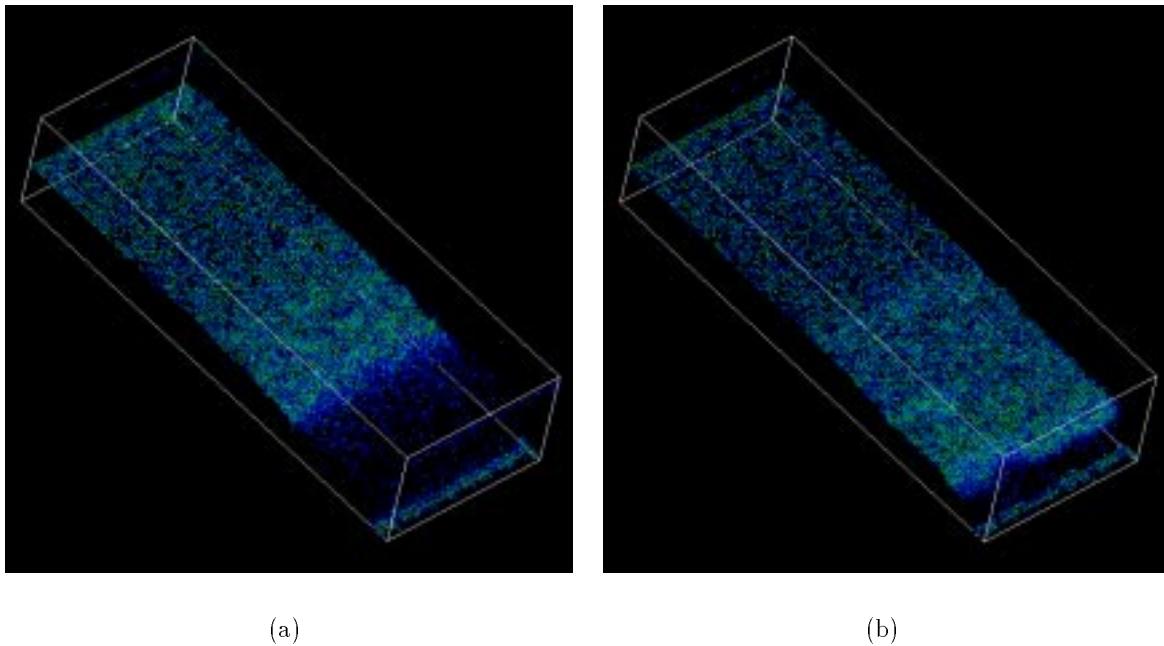


Abbildung 5.12: Zusätzliche Mittelung über Volumenelemente des Raumes. Zeitschritte 1500 (a) bzw. 3000 (b).

tion mit Mikrokonvergenz. Während dort die Atome im von der Versetzung durchquerten Gebiet sich sehr schnell in eine energetisch günstige Position bewegten und fortan in Ruhe blieben, sind bei der mikrokkanonischen Rechnung starke Bewegungen zu beobachten. Offenbar emittiert die sich bewegende Versetzung elastische Wellen. Atome schwingen offenbar um ihre Gleichgewichtslagen. So sind die Linienstrukturen in der Stapelfehlerebene stellenweise nicht mehr zu erkennen.

Auch fallen manche Atome aus dem dargestellten Energiebereich heraus, indem sie ihre potentielle Energie an Nachbaratome abgeben. Genauso tauchen vorher nicht abgebildete auf, die genug Energie aufgenommen haben, um in den dargestellten Bereich zu gelangen. Auch fallen weiterhin die abgebildeten Atome aus der Stapelfehlerebene und dem Versetzungskern in denselben Energiebereich, so daß auch in diesem Fall keine Trennung dieser beiden Bereiche möglich ist.

Aus diesen Gründen wurden die Visualisierungsmethoden etwas modifiziert. Die gesamte Probe wurde in kleine Quader mit einer Kantenlänge von wenigen Rhomboederkanten aufgeteilt. In jedem dieser Quader wurde die differentielle potentielle Energie aller enthaltenen Atome aufsummiert. Das Quader wurde nur dann abgebildet, wenn diese Summen einen Schwellenwert von 10 LJ-Einheiten überschritten. Durch die Betrachtung mehrerer Atome innerhalb eines Volumens konnten durch Energieübertragung auf nächste Nachbarn entstehende Effekte weitgehend ausgeschaltet werden. In Abb. 5.12 ist dies für die Zeitschritte 1500 bzw. 3000 veranschaulicht. Ein Nachteil bestand darin, daß auch einige

Quader außerhalb der Stapelfehlerebene oder des Versetzungskernes die Energieschwelle überschritten, was auf lokale Energiekonzentrationen aufgrund der von der Versetzung emittierten Wellen zurückzuführen ist. Für die Analyse stellte dies jedoch keine wesentliche Behinderung dar.

Eine weitere verwendete Visualisierungsmethode basiert auf dem Sachverhalt, daß die Atomdichte im Bereich des Versetzungskernes gegenüber der restlichen Probe erhöht ist. Daher wurden die in den Quadern enthaltenen Atome gezählt und erstere nur dann abgebildet, wenn ihre Anzahl einen bestimmten Wert überstieg. Das Ergebnis zu den Zeitschritten 1000, 1500, 2000 und 2500 ist in Abb. 5.15 dargestellt. Es gelingt mit dieser Methode, die Versetzungslinie und den Stapelfehler zu trennen.

Schließlich wurden die Verschiebungsfelder als Funktion der Koordinate x berechnet und zur Analyse verwendet.

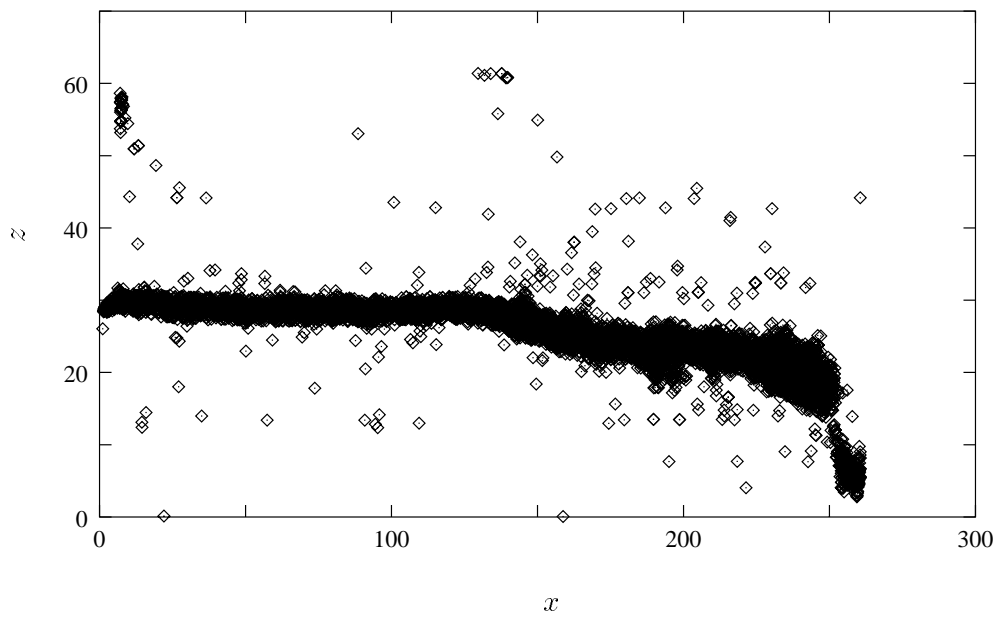
5.3.2 Analyse der Versetzungsbewegung

Man beobachtet ähnliche Effekte wie bei der inhomogenen Verschiebung unter Verwendung der Mikrokonvergenz. Die Versetzung gleitet zunächst auf der anfänglichen Gleitebene $z = 28,6$. Nach etwa 500 Zeitschritten beginnt sie nach unten zu klettern. Im folgenden findet offenbar eine weitere Gleitbewegung auf der Gleitebene $z = 23$ mit einem zweitgrößten Abstand von 0,526 statt (Abb. 5.13). Auch hier stellen offenbar die durch das Festhalten der Ränder hervorgerufenen Spannungen die Ursache dar.

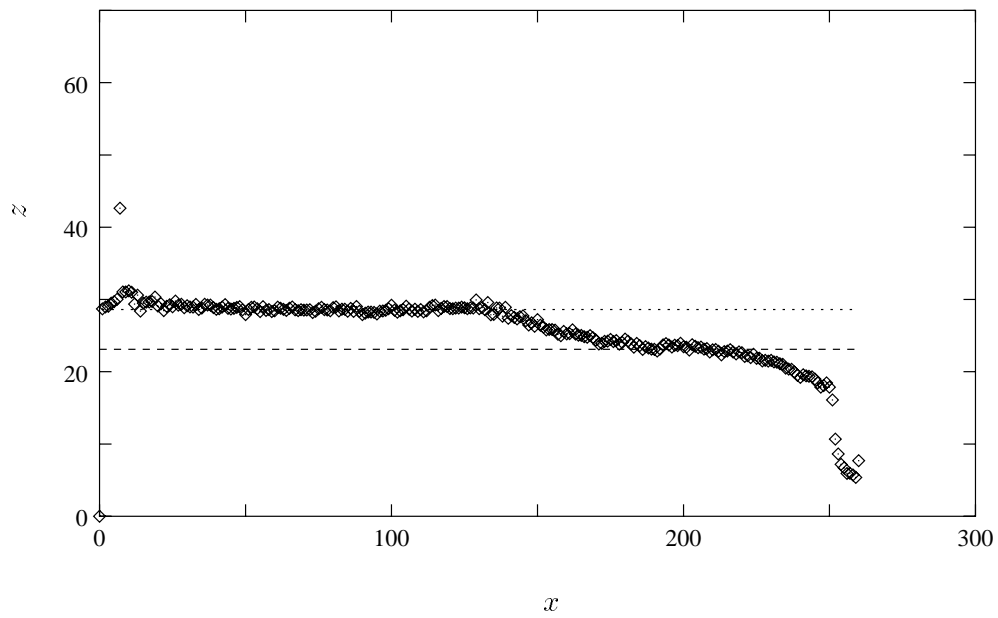
Aus den Konfigurationen zu den Zeitschritten 100 und 1000 wurde das Verschiebungsfeld u_x in Abhängigkeit von x berechnet, in Intervallen der Länge 1 gemittelt und aufgezeichnet (durchgezogene Kurven in Abb. 5.14). Durch numerisches Differenzieren wurde die Burgersvektordichte bestimmt (gestrichelte Kurven in Abb. 5.14), um einen Faktor 10 überhöht). Es ergibt sich eine x -Koordinate der Versetzungslinie von 129 bzw. 141.

Die Mittelung der Differenz der potentiellen Energie liefert Bilder wie in Abb. 5.12. Auch hier ist die Versetzungsbewegung zu erkennen. Man erkennt in der Aufnahme des 1500. Zeitschrittes (Abb. 5.12(a)) einen leicht gekrümmten Verlauf mit zwei Kinkenpaaren. Im 3000. Zeitschritt (Abb. 5.12(b)) hat sich die Versetzung nahezu komplett durch die Probe hindurchbewegt.

Die Methode der Zählung der in den Quadern enthaltenen Atome ist in Abb. 5.15 dargestellt. Zu den Zeitschritten 1000, 1500, 2000 und 2500 wurden nur jene Quader abgebildet, in denen sich mehr als 10 Atome befanden. Die Versetzungslinie ist deutlich zu erkennen, allerdings ist die Auflösung relativ schlecht. So ist es schwierig, aus diesen Bildern zu entscheiden, ob die Versetzungslinie einen geraden oder gekrümmten Verlauf nimmt.



(a)



(b)

Abbildung 5.13: Analyse der Kletterbewegung durch Betrachtung der Atome mit erhöhter Differenz der potentiellen Energie in Versetzungslinienrichtung. In (b) wurde die z -Koordinate in Intervallen der Länge 1 auf der x -Achse gemittelt.

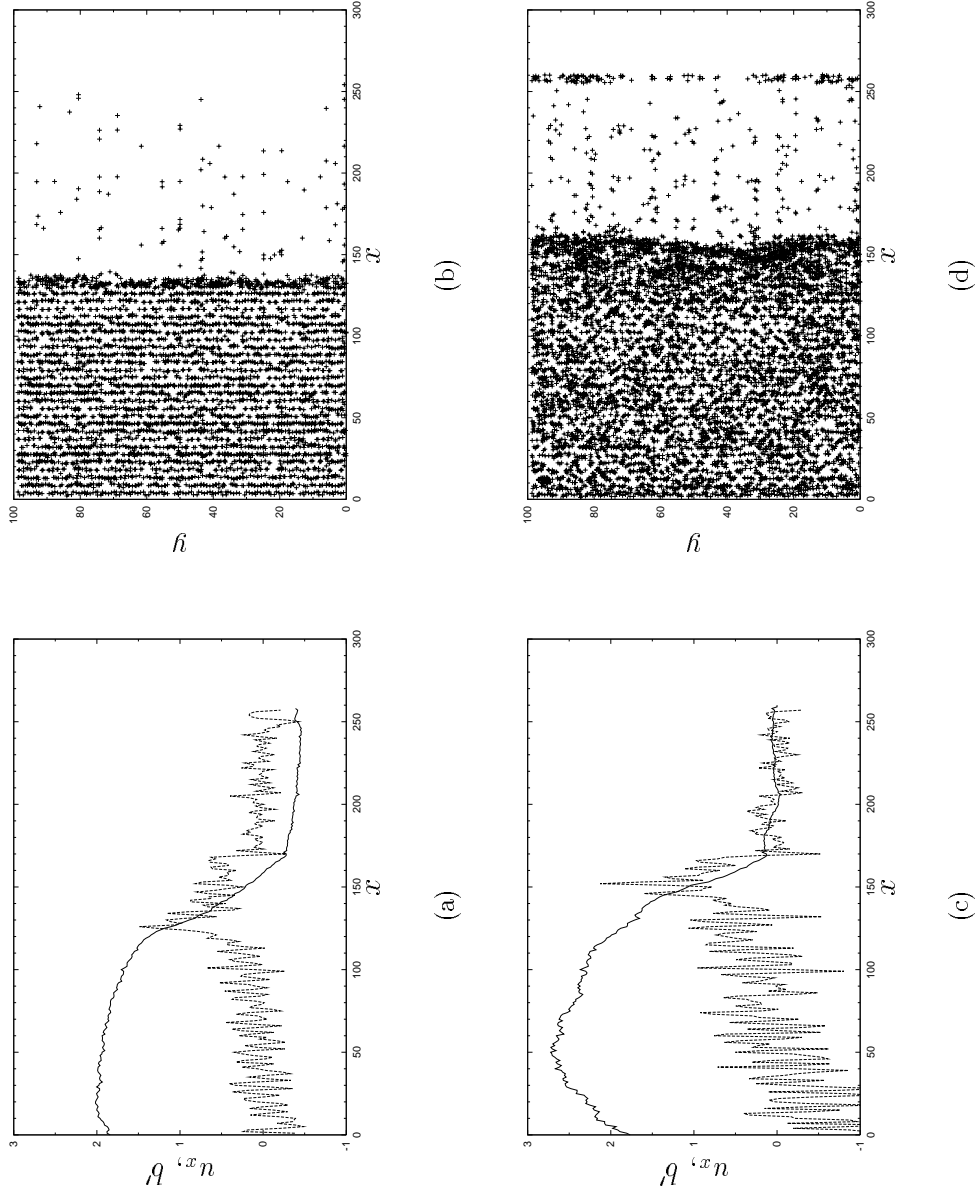


Abbildung 5.14: Analyse des Verschiebungsfeldes bei der homogenen Scherung zu den Zeitschritten 500 (obere Zeile) und 1000 (untere Zeile). Links sind Verschiebung u_x und Burgersvektordichte b' abgebildet (letzte um den Faktor 10 überhöht). Rechts sind die Atome mit erhöhter potentieller Energiedifferenz abgebildet, die Blickrichtung ist normal zur Gleitebene.

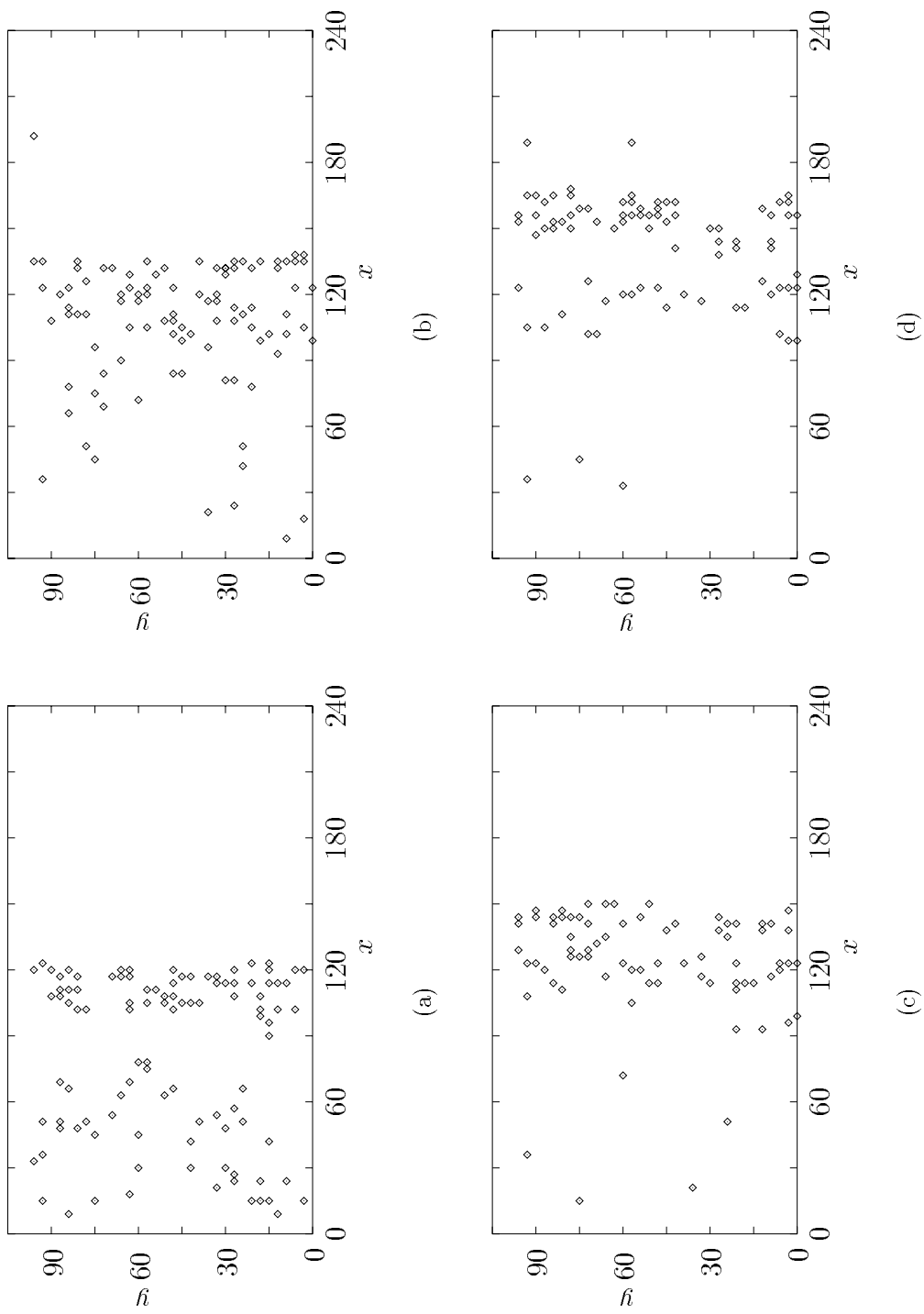


Abbildung 5.15: Direkte Visualisierung der Versetzungslinie durch Zählung der Atome. Abgebildet sind die Zeitschritte 1000, 1500, 2000 und 2500 (von a bis d).

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigte sich mit der Analyse von Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen ikosaedrischen Quasikristallen durch numerische Simulationen, die sich der Methode der Molekulardynamik bedienen.

Zunächst wurde die Gamma-Oberfläche, d.h. die Energie als Funktion der starren Verschiebung zweier Quasikristallhälften gegeneinander entlang einer Gleitebene, berechnet. Dies wurde für verschiedene Gleitebenen normal zu ausgezeichneten Symmetrierichtungen des verwendeten Quasikristallmodells durchgeführt. Die Minima dieser Funktion dienten als Burgersvektoren für Versetzungen, die in eine Probe eingebaut wurden.

Um deren Eignung zu testen, wurden diese Proben relaxiert, d.h. die Atome konnten sich frei unter dem Einfluß der gegenseitigen Wechselwirkungen bewegen, bis ein Minimum der potentiellen Energie des Systems erreicht war. Für ein geeignetes Minimum blieben die Konfigurationen stabil.

Anschließend wurden diese Proben durch verschiedene Verfahren plastisch verformt. Dabei wurden die Bewegungsgleichungen aller Atome am Temperaturnullpunkt unter Berücksichtigung der äußeren Spannungen gelöst und die zeitliche Entwicklung des Systems verfolgt.

Ein Verfahren zur Visualisierung der Versetzungskerne und des von ihnen hinterlassenen Stapelfehlers wurde entwickelt. Es basiert auf der erhöhten potentiellen Energie dieser Atome. Dabei muß diese aufgrund der zahlreichen unterschiedlichen Atomumgebungen auf einen Referenzwert für eine perfekte Probe normiert werden.

Durch bestimmte Behandlung des Datenmaterials (Mittelung über kleine Probenbereiche) war es möglich, die Bewegung der Versetzung durch die Quasikristallprobe zu verfolgen. Außerdem gelang es, den Versetzungskern einzeln zu visualisieren.

Die Berechnung der Gamma-Oberflächen lieferte folgende Resultate:

- Es ergeben sich Energieflächen, die die Symmetrien der gewählten Gleitebene widerspiegeln.
- Die gefundenen Minima liegen in einem Bereich von einigen Prozent der Bindungsenergie.

Der Einbau der Versetzung und die anschließende Relaxation erbrachten folgende Ergebnisse:

- Es ist möglich, durch Aufprägen eines Verschiebungsfeldes nach PEIERLS-NABARRO eine stabile Versetzungskonfiguration zu erhalten.
- Verschiedene aus den Gamma-Oberflächen erhaltene Burgersvektoren erweisen sich als geeignet.
- Nach Versetzungseinbau vergrößern sich die Nächste-Nachbar-Abstände in der Probe um 3 %, um den selben Betrag vergrößert sich auch der Burgersvektor.
- Nach der zweistufigen Relaxation liegt ein Verschiebungsfeld vor, das gut mit der Lösung von PEIERLS und NABARRO beschrieben werden kann.

Die Scherung einer Probe von 135740 Atomen mit eingebauter Versetzung durch Verschieben der starren Randblöcke unter Anwendung der Mikrokonvergenzmethode lieferte folgende Erkenntnisse:

- Ab einer kritischen Spannung von 0,07 beginnt die Versetzung sich zu bewegen.
- Die Bewegung erfolgt als gemischte Gleit- und Kletterbewegung. Dabei findet die Gleitbewegung offenbar auf zweizähligen Gleitebenen mit größt- und zweitgrößtmöglichem Abstand statt, zwischen diesen Gleitabschnitten erfolgt Klettern.
- Die Gleitbewegung erfolgt durch Ausbilden von Kinkenpaaren.
- Der Schubmodul beträgt 78,5.
- Die Kletterbewegung ist auf die verwendeten Randbedingungen (festgehaltene Randatome) zurückzuführen.

Die Scherung einer Probe von 1504580 Atomen mit eingebauter Versetzung durch Aufbringen eines homogenen Verzerrungsfeldes ergab folgende Resultate:

- Oberhalb einer kritischen Verzerrung beginnt die Versetzung nach einer relativ kurzen Einschwingphase unter Abnahme der potentiellen Energie sich zu bewegen. Diese kritische Verzerrung liegt zwischen 2 und 2,15 % der Probenlänge. Die Versetzung bewegt sich zum rechten Rand der Probe, die sie nach etwa 3300 Zeitschritten erreicht. Eine Abgleitung einer Kristallhälfte ist feststellbar, allerdings ist sie durch die starke Verbiegung der Ebenenstrukturen parallel zur Gleitebene nicht quantitativ zu bestimmen.
- Die Bewegung erfolgt als abschnittsweise Gleitbewegung auf Gleitebenen normal zu einer zweizähligen Richtung. Zwischen diesen Abschnitten findet ein Klettern statt. Dieses Klettern wird wiederum von den starren Randbedingungen ausgelöst, die das Spannungsfeld modifizieren.

- Die Gleitbewegung findet nicht in Form einer geradlinigen Vorwärtsbewegung der Versetzungslinie statt. Vielmehr entstehen Kinkenpaare durch Pinning der Versetzungslinie an verschiedenen Punkten der Gleitebene. Es konnten keine strukturellen Gemeinsamkeiten dieser Punkte festgestellt werden.
- Von der sich bewegenden Versetzung gehen in hohem Maße elastische Wellen aus. Diese führt zu starken Schwingungen der Atome, insbesondere jener im Stapelfehler.

Diese Erkenntnisse eröffnen einige Ansatzpunkte für weitergehende Untersuchungen zum Verhalten von Versetzungen in Quasikristallen.

Die berechneten Gamma-Oberflächen bieten eine Vielzahl von Burgersvektoren und sich daraus ergebenden Richtungen, in die Scherexperimente geführt werden können. Dabei kann mit den verwendeten Visualisierungsverfahren die Versetzungsbewegung genauestens verfolgt werden.

Die Ursache für die Kinkenbildung und der jeweiligen Auslösung des „sprunghaften“ Kletterns an bestimmten Punkten auf dem Weg der Versetzung bleibt ungeklärt. Um die Vermutung zu prüfen, hochkoordinierte Cluster im Weg der Versetzung seien dafür verantwortlich, sollte zunächst deren Vorkommen gezielt untersucht werden. Aus der Analyse der Versetzungsbewegungen bei Scherexperimenten in verschiedene Richtungen mit unterschiedlichen Burgersvektoren könnten dann Zusammenhänge gefolgert werden.

Auch könnten Scherungen bei höheren Temperaturen aufschlußreich sein. Insbesondere interessiert die Frage, ob die Versetzung sich dann eher geradlinig durch strukturelle Hindernisse hindurch bewegt. Eine zweite interessante Frage besteht in diesem Zusammenhang nach einem teilweisen oder gar kompletten Ausheilen des Stapelfehlers, wie dies in Experimenten beobachtet wurde.

Des weiteren empfiehlt es sich, Rechnungen mit anderen Potentialen durchzuführen, insbesondere um die Güte der quantitativen Voraussagen zu verbessern. Dabei ist auch eine Erweiterung des verwendeten Algorithmus auf Mehrkörperpotentiale in Erwägung zu ziehen. Hierzu sind bereits verschiedene Vorarbeiten geleistet worden.

Anhang A

Zur linearen Elastizitätstheorie

Wir betrachten einen Körper, den wir uns aus kontinuierlichem Material aufgebaut denken und führen zwei Koordinatensysteme ein: ein raumfestes System \mathbf{x} und ein körperfestes $\boldsymbol{\xi}$. Zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 sollen beide Systeme übereinstimmen:

$$\mathbf{x}(t_0) = \boldsymbol{\xi}(t_0) \quad (\text{A.1})$$

Dieser **Referenzzustand** sollte einen möglichst ausgezeichneten Zustand darstellen, zum Beispiel eine spannungsfreie Konfiguration. Wird der Körper dann unter dem Einfluß äußerer Spannungen verzerrt, unterscheiden sich seine Beschreibungen in den beiden Koordinatensystemen. Wir führen das **Verschiebungsfeld** \mathbf{u} zu

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.2})$$

ein. Es beschreibt die Auslenkung eines Punktes im Material aus dem Referenzzustand. Wir entwickeln \mathbf{u} in eine Taylorreihe nach \mathbf{x} und schließen reine Translationen des Materials aus, so daß der führende Term linear in \mathbf{x} ist. Er enthält den Gradienten des Verschiebungsfeldes.

Die lineare Elastizitätstheorie geht davon aus, daß die betrachteten Verschiebungen klein sind und betrachtet lediglich diesen führenden Term. Wir betrachten den symmetrierten Gradienten des Verschiebungsfeldes

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{A.3})$$

der als **Greenscher Verzerrungstensor** bezeichnet wird. Die elastische Energie $W = W(\epsilon_{ij})$ als Funktion der Verzerrungen wird nach Potenzen von ϵ um den Referenzzustand entwickelt, der als spannungsfreie Konfiguration ein Energieminimum darstellt. Damit ist bei geeigneter Normierung der erste nichtverschwindende Term der in den Verzerrungen quadratisch:¹

$$W = \frac{1}{2} \epsilon_{ij} C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (\text{A.4})$$

¹Hier und im folgenden soll stets die Einsteinsche Summenkonvention gelten, d.h. über paarweise auftretende Indizes wird summiert.

Durch Differenzieren nach den Verzerrungen erhalten wir das **Hookesche Gesetz**

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (\text{A.5})$$

mit dem **Tensor der elastischen Konstanten** $C_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}}$. Dieser ist ein Tensor 4. Stufe mit 81 Komponenten, die sich aufgrund verschiedener Symmetrien auf 21 reduzieren.

Im isotropen Fall bleiben aufgrund weiterer Symmetrien nur zwei übrig, die **Lamé-Konstanten** λ und μ , so daß sich

$$C_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (\text{A.6})$$

und für die Spannungen

$$\sigma_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij}\epsilon_{kk} \quad (\text{A.7})$$

ergibt.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Beugungsbild von i-AlMn	10
1.2	Elektronenmikroskopische Aufnahme von AlCuLi und AlCuFe	11
1.3	Penrosemuster und dazugehörige Tiles, Anpaßregeln	14
1.4	Streifenprojektionsformalismus	16
1.5	Flip im Penrosemuster	17
1.6	Zur Gridmethode	18
1.7	Dualisierungsschritt	19
1.8	Zur Konstruktion rationaler Approximanten	20
1.9	Prolates und oblates Rhomboeder	21
1.10	Rhombisches Dodekaeder	22
1.11	Bänder in zweidimensionalen Quasikristallen	23
1.12	Prolates und oblates Rhomboeder bei der TI-Dekoration	25
1.13	Übergang zum binären ikosaedrischen Modell	27
2.1	Ideale Spannungs-Dehnungs-Beziehung	30
2.2	Elementarer Gleitprozeß	30
2.3	Veranschaulichung des starren Abgleitens	30
2.4	Stufen- und Schraubenversetzung	31
2.5	Gleitprozeß durch Bewegung einer Stufenversetzung	32
2.6	Zur Erzeugung von Versetzungen im Kontinuumsbild	33
2.7	Spiegelversetzung	36
2.8	Zur Definition des Burgersvektors	37
2.9	Perfekte und imperfekte Versetzungen	38
2.10	Kinken und Sprünge	39
2.11	{111}-Ebene eines fcc-Gitters	40
2.12	Superversetzungen	41
2.13	Gamma-Oberfläche eines fcc-Kristalls	42
2.14	Zum Peierls-Nabarro-Modell	44
2.15	Zum erweiterten Volterra-Prozeß	47
2.16	Experimente zu Versetzungen in Quasikristallen	48
2.17	Schersimulation von Mikulla	49
2.18	Schersimulation von Dilger	50
3.1	Lennard-Jones-Potential	57

3.2	Zur Verwendung von Nachbarlisten	58
3.3	Link-Cell-Methode	59
3.4	Durchführung eines Scherschlittes	60
3.5	Zur Mikrokonvergenz	61
4.1	Zur Vorgehensweise bei der Gamma-Oberflächen-Berechnung	63
4.2	Übersicht Gamma-Oberflächen	65
4.3	Übersicht über die dem Ursprung nächsten Minima	67
4.4	Gamma-Oberflächen	68
5.1	Energien während der Relaxation.	73
5.2	Paarverteilungsfunktionen während der Relaxation.	73
5.3	Verschiebungsfelder während der Relaxation	74
5.4	Burgersvektordichten nach der Relaxation	74
5.5	Energieverlauf bei der inhomogenen Scherung	75
5.6	Gleitbewegung bei der inhomogenen Scherung	76
5.7	Analyse der Kletterbewegung bei der inhomogenen Scherung	77
5.8	Gleitbewegung durch Ausbildung von Kinkenpaaren bei der inhomogenen Scherung	79
5.9	Energieverlauf bei der homogenen Scherung	80
5.10	Konfigurationen bei der homogenen Scherung	81
5.11	Zur Visualisierung der Differenz der potentiellen Energie	82
5.12	Zusätzliche Mittelung über Volumenelemente des Raumes	83
5.13	Analyse der Kletterbewegung.	85
5.14	Analyse des Verschiebungsfeldes bei der homogenen Scherung	86
5.15	Direkte Visualisierung der Versetzungslinie	87

Tabellenverzeichnis

1.1	Ebenenabstände im Ammann-Kramer-Penrose-Tiling	24
1.2	Ebenenabstände im binären ikosaedrischen Modell	26
3.1	Potentialparameter	57
4.1	Zu den verwendeten Approximanten	64
4.2	Minima der Gamma-Oberfläche für die zweizählige Richtung	66
4.3	Minima der Gamma-Oberfläche für die dreizählige Richtung	66
4.4	Minima der Gamma-Oberfläche für die fünfzählige Richtung	66

Literaturverzeichnis

- [1] M. Audier and P. Guyot. *Quasicrystals*. World Scientific, 1990.
- [2] M. Audier, P. Sainfort, and B. Dubost. A simple construction of the AlCuCo quasicrystalline structure related to the $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$, cubic structure type. *Philos. Mag. Lett.*, 61:L105 L111, 1990.
- [3] Jürgen Bachteler. Zur Elastizitätstheorie in ikosaedrischen Quasikristallen. Master's thesis, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, Februar 1994.
- [4] L. Bendersky. Quasicrystal with one-dimensional translational symmetry and a tenfold rotation axis. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1461–1463, 1985.
- [5] J. Bohsung and H.-R. Trebin. Defects in quasicrystals. In M. V. Jarić, editor, *Introduction to the Mathematics of Quasicrystals*, volume 2 of *Aperiodicity and Order*, pages 183–221. Academic Press, Boston, 1989.
- [6] Jörg Bohsung. Defekte in Quasikristallen. Master's thesis, Universität Stuttgart, 1987.
- [7] M. Boissieu, M. Durand-Charre, P. Bastie, A. Carabelli, M. Boudard, M. Besière, S. Lefebvre, and C. Janot. Centimetre-size single grain of the perfect Al-Pd-Mn icosahedral phase. *Phil. Mag. Lett.*, 65:147–153, 1992.
- [8] L. Bresson. *Mechanical Properties of Quasicrystals*. Les éditions de physique, Les Ulis, 1994.
- [9] J. M. Burgers. Some considerations on the fields of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice. ii. (solutions of the equations of elasticity for a non-isotropic substance of regular crystalline symmetry.). *Proceedings of Kon. Ned. Akad. v. Wetensch.*, 42(5):378–399, 4 1939. siehe Burgers1939a.
- [10] Ch.Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. R. Oldenbourg Verlag München, John Wiley & Sons GmbH Frankfurt, 3. Auflage, 1973.
- [11] N. G. de Bruijn. Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane. *Nederl. Akad. Wetensch. Proceedings of Ser. A*, 43:39–66, 1981.

- [12] U. Dehlinger and A. Kochendörfer. Eigenbewegungen in Kristallgittern. *Z. Phys.*, 116:576–585, 1940.
- [13] J. Devaud-Rzepky, M. Cornier-Quiquandon, and D. Gratias. *Analysis of dislocations in icosahedral AlCuFe alloy*. Proceedings of Third Int. Conference on Quasicrystals, Vista Hermosa, Mexico, 1994.
- [14] C. Dilger, R. Mikulla, J. Roth, and H.-R. Trebin. Simulation of shear stress in icosahedral quasicrystals. *Philos. Mag. A*, 75(2):425–441, 1997.
- [15] Christian Dilger. Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen. Master's thesis, Universität Stuttgart, 1995.
- [16] *Bulk and surface properties of quasicrystalline materials and their potential applications*, 1997.
- [17] B. Dubost, J. M. Tanaka, P. Sainfort, and M. Audier. Large AlCuLi single quasicrystals with triacontahedral solidification morphology. *Nature*, 324:48–50, 1986.
- [18] Veit Elser. The diffraction pattern of projected structures. *Acta Crystallogr. Sect. A*, 42:36–43, 1986.
- [19] J. D. Eshelby. Edge dislocations in anisotropic materials. *Philos. Mag.*, 40:903–912, 1949.
- [20] F. C. Frank. Crystal dislocations — elementary concepts and definitions. *Phil. Mag.*, 51:809, 1951.
- [21] J. Frenkel. Zur Theorie der Elastizitätsgrenze und der Festigkeit kristallinischer Körper. *Z. Phys.*, 37:572, 1926.
- [22] J. Frenkel and T. Kontorova. . *Phys. Z. Sowj.*, 13:1, 1938.
- [23] W. Friedrich, W. P. Knipping, and M. Laue. Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen. *Sitzungsberichte Bayrische Akademie der Wissenschaften*, 303 322, 1912.
- [24] R. J. Haüy. *Essai d'une théorie sur la structure des cristaux*. Traité de cristallographie, 1784.
- [25] C. L. Henley. Sphere packings and local environments in penrose tilings. *Phys. Rev. Lett.*, 34:797–816, 1986.
- [26] C. L. Henley and V. Elser. Quasicrystal structure of $(\text{Al}, \text{Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$. *Philos. Mag. B*, 53:L59 L66, 1986.
- [27] R. Mikulla J. Roth H.-R. Trebin. Motion of dislocations in a two-dimensional decagonal quasicrystals. *Journal Non. Cryst. Sol.*, 153-154:272–275, 1993.

- [28] A. Katz and M. Duneau. Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry. *J. Phys. France*, 47:181–196, 1986.
- [29] J. Kepler. *Harmonice Mundi*. Johannes Kepler, 1619.
- [30] P. Kramer and R. Neri. Non-periodic central space filling with icosahedral symmetry using copies of seven elementary cells. *Acta Crystallogr. Sect. A*, 38:257–264, 1982.
- [31] T. Kupke. *Ebenen- und Stringstrukturen in ikosaedrischen Quasigittern und ihre Bedeutung für die Ionengitterführung*. PhD thesis, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, 1992. PhD thesis.
- [32] F. Lançon and L. Billard. Thermodynamical Properties of a Two-Dimensional Quasicrystal from Molecular Dynamics Calculations. *Europhysics Lett.*, 2(8):625–629, 1986.
- [33] F. Lançon and L. Billard. Two-dimensional System with a Quasycrystalline Ground State. *Journal Phys. France*, 49:249–256, February 1988.
- [34] D. Levine and P. J. Steinhardt. Quasicrystals: a new class of ordered structures. *Phys. Rev. Lett.*, 53:2477–2480, 1984.
- [35] Dov Levine, T. C. Lubensky, Stellan Ostlund, Sriram Ramaswamy, P. J. Steinhardt, and John Toner. Elasticity and dislocations in pentagonal and icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1520–1523, 1985.
- [36] R. Mikulla, J. Roth, and H.-R. Trebin. Simulation of shear stress in two-dimensional decagonal quasicrystals. *Phil. Mag. B*, 71(5):981–989, 1995.
- [37] F. R. N. Nabarro. Dislocations in a simple cubic lattice. *Proceedings of Phys. Society*, 59:256–272, 1947.
- [38] E. Orowan. Zur Kristallplastizität. iii. über den Mechanismus des Gleitvorganges. *Z. Phys*, 89:605, 1934.
- [39] L. Pauling. Apparent icosahedral symmetry is due to directed, multiple twinning of cubic crystals. *Nature*, 317:512–514, 1985.
- [40] R. Peierls. The size of a dislocation. *Proceedings of Phys. Society*, 52:34–37, 1940.
- [41] R. Penrose. The rôle of aesthetics in pure and applied mathematical research. *Bull. Institute Math. and its Appl.*, 10:266–271, 1974.
- [42] M. Polanyi. Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte. *Z. Phys.*, 89:605, 1934.
- [43] Johannes Roth. Stabilität von Quasikristallen. Master’s thesis, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, Juli 1987.

- [44] Andreas Rüdinger. Der phasonische Freiheitsgrad in ikosaedrischen Quasikristallen : Auswirkungen auf Selbstdiffusion, Ebenenstruktur und Versetzungen. Master's thesis, Universität Stuttgart, Dez. 1994.
- [45] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-ranged orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951, 1984.
- [46] Joshua E. S. Socolar, T. C. Lubensky, and Paul J. Steinhardt. Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 34:3345–3360, 1986.
- [47] G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. *Proceedings of Roy. Society*, **A145**:362–415, 1934.
- [48] Th.Zoglauer. Methoden zur konstruktion quasikristalliner strukturen. Master's thesis, Universität Stuttgart, 1986. Master's thesis.
- [49] S. Toxværd. Molecular Dynamics at Constant Temperature and Pressure. *Phys. Rev. E*, 47(1):343–350, 1993.
- [50] A. Tsai, A. Inoue, Y. Yokoyama, and T. Masumoto. Stable icosahedral AlPdMn and AlPdRe alloys. *Mat. Transactions JIM*, 31:98–103, 1990.
- [51] L. Verlet. Computer 'experiments' on classical fluids I: Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.*, 159:98–103, 1967.
- [52] V. Vitek. Theory of the core structures of dislocations in body-centered-cubic metals. *Cryst. Latt. Def.*, 5:1–34, 1974.
- [53] M. Wollgarten, M. Bartsch, U. Messerschmidt, M. Feuerbacher, R. Rosenfeld, M. Beyss, and K. Urban. In situ observation of dislocation motion in icosahedral Al-Pd-Mn single quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, 71:99–105, 1995.
- [54] M. Wollgarten, M. Beyss, K. Urban, H. Liebertz, and U. Köster. Direct evidence for plastic deformation of quasicrystals by means of a dislocation mechanism. *Phys. Rev. Lett.*, 71(4):549–552, 1993.
- [55] M. Wollgarten and K. Urban. *12: Dislocations and plasticity of quasicrystals*. Les éditions de physique, Les Ulis, 1994.
- [56] G. Zeger and H.-R. Trebin. A simple tiling model and phason kinetics for decagonal AlCuCo. *Phys. Rev. B*, 52:R720 R724, 1996.
- [57] Z. Zhang and K. Urban. Transmission electron microscope observations of dislocations and stacking faults in a decagonal Al-Cu-Co alloy. *Philos. Mag. Lett.*, 60:97, 1989.
- [58] S. J. Zhou, D. M. Beazley, P. S. Lomdahl, A. F. Voter, and B. L. Holian. Dislocation emission from a three-dimensional crack — a large-scale molecular dynamics study.

An dieser Stelle möchte ich mich bedanken bei

- Herrn Prof. Hans-Rainer Trebin für die freundliche Aufnahme am Institut für Theoretische und Angewandte Physik und die interessante Aufgabenstellung. Er war immer bereit, mich zu unterstützen, gab mir aber gleichzeitig die Möglichkeit, das Thema selbständig zu bearbeiten.
- Herrn Prof. Hans-Jörg Herrmann für die Übernahme des Mitberichts.
- Ralf Mikulla für die hervorragende Betreuung dieser Arbeit und die geduldige Beantwortung zahlloser Fragen, was in der zweiten Hälfte dieser Arbeit sogar über den Atlantik hinweg funktionierte.
- Johannes Roth für die Bereitstellung eines Programms zur Erzeugung großer Approximanten und zahllose Erläuterungen zum Themengebiet der Quasikristalle.
- Jörg Stadler für seine Hinweise zur Bedienung und Erweiterung seines Molekulardynamikprogrammes IMD.
- Herrn Dr. Peter Gumbsch vom Max-Planck-Institut für Metallforschung für Erklärungen und Diskussionen zum Thema Versetzungen.
- Jochen Englert und Michael Reichenstein sowie Johannes Roth, Jörg Stadler und Martin Hohl, die als \LaTeX - bzw. Systemmanager für eine exzellent funktionierende Arbeitsumgebung sorgten.
- Folgenden Mitarbeitern des Instituts, ohne ihre Beiträge zu dieser Arbeit im einzelnen aufzuzählen: Jürgen Bachteler, Marco Brunelli, Franz Gähler, Michael Reichenstein, Andreas Rüdinger und Gabriele Zeger. Auch danke ich allen Mitarbeitern des ITAP und des Sekretariats für die angenehme Arbeitsatmosphäre.
- Meinen Kommilitonen Holger Kollmer, Steffen Krusch, Marc Lätzel und Markus Schulte für gemeinsame physikalische und weniger physikalische Unternehmungen während unseres Studiums.
- Meinen Eltern, die mich während meines Studiums stets unterstützt und mir meine Ausbildung ermöglicht haben. Ihnen ist diese Arbeit gewidmet.