

Definition eines geometrischen Korngrenzenwiderstandes  
zur Quantifizierung der kristallographischen Fehlpassung  
benachbarter Kornorientierungen

Dissertation

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

**von Dipl.-Phys. Alain Franz Knorr**

Saarbrücken, 2014

Tag des Kolloquiums: 29. Juli 2014

Dekan: Prof. Dr. Volkhard Helms

Berichterstatter: Prof. Dr. Horst Vehoff  
Prof. Dr. Frank Mücklich

Vorsitz: Prof. Dr. Rolf Hempelmann

Akad. Mitarbeiter: Dr. Frank Aubertin

## Kurzfassung

Die Arbeit setzt sich mit der Frage auseinander, wie der Begriff der Fehl- bzw. Mißorientierung zwischen zwei Körnern, durch einen neuen Parameter ersetzt werden kann, der die geometrische Kopplung der benachbarten Gleitsysteme erfassen soll, wie sie durch die räumliche Lage der Korngrenzenfläche bedingt werden. Dieser Parameter, die geometrische Gleitsystempassung, soll im Sinne der allgemeinen, für Gleitsystemprozesse zu beobachtende Hinderniswirkung einer Korngrenze, deren Widerstandswirkung bezüglich eben diesem Barriere-Effekt quantitativ zum Ausdruck bringen.

Da mit der klassischen Angabe der Fehlorientierung lediglich eine Einteilung in Kleinwinkel- und Großwinkelkorngrenze möglich ist, können Gleittransferprozesse bei „vermeintlich“ stark mißorientierten Körnern mit diesem Konzept nicht beschrieben werden. Tatsächlich lassen sich jedoch solche Konfigurationen experimentell beobachten, bei denen – abhängig von der lokalen Orientierung der Korngrenze – sich zwei benachbarte Gleitsysteme in guter Übereinstimmung auf der Korngrenzen(ebene) treffen und somit die geometrischen Bedingungen erfüllen, um einen Transfer von Gleitung (Transmission von Versetzungen) zu ermöglichen. Dieser Effekt wird durch das in dieser Arbeit entwickelte **STRONG**-Konzept (*Slip Transfer Resistance Of Neighboring Grains*) beschrieben, indem der so definierte Gleit-Transfer-Widerstand der Korngrenze umso kleiner ausfällt, je besser sich die geometrische Gleitsystempassung auf der Korngrenze darstellt.

## Abstract

Topic of the thesis is the definition of a geometric grain boundary resistance quantifying the crystallographic misorientation between neighboring grains. Main question is how to substitute the common term of misorientation through a concept of geometric mismatch between the interacting slip systems from both grains including the corresponding grain boundary plane. A new definition of such a mismatch parameter is supposed to describe the blocking effect of the grain boundary in a better way than the usual misorientation it does.

Since the misorientation traditionally solely affords a classification in low angle and high angle grain boundaries (unremarkable the actual position of the grain boundary) or even an identification of a CSL  $\Sigma$  relation that is why actual slip transfer processes at high angle boundaries cannot be described sufficiently in this concept. But there are such configurations with explicit grain boundary conditions in which selected neighboring slip systems can encounter each other on the boundary plane in a geometric well-fitting manner in spite of the predetermined large crystallographic misorientation. To quantify this geometric match or contrariwise mismatch a mathematic method was developed, the so called **STRONG** concept (Slip Transfer Resistance Of Neighboring Grains), which maintains a parameter – the grain boundary resistance – describing the barrier effect for dislocation transmission through the boundary dependent of its three dimensional layer.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Kurzfassung</b> .....	<b>iii</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>iv</b>
<b>Inhaltsverzeichnis</b> .....	<b>v</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b> .....	<b>vii</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b> .....	<b>xiv</b>
<b>Abkürzungs- und Symbolverzeichnis</b> .....	<b>xv</b>
<b>Danksagung</b> .....	<b>xviii</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>2</b>
<b>2 Grundlagen und Stand der Forschung</b> .....	<b>8</b>
2.1 Grain Boundary Engineering (GBE) .....	8
2.2 Die Korngrenze .....	10
2.3 Die Kornorientierung.....	13
2.4 Die Missorientierung zweier Körner .....	17
2.4.1 CSL- $\Sigma$ -Beziehungen .....	21
2.5 Die Gleitsystemcharakteristik .....	24
2.6 Die Korngrenzenorientierung.....	27
2.7 Der Einfluss der Korngrenze .....	29
2.8 Das LRB-Konzept .....	33
2.8.1 Betrachtung der Inkompatibilitätsspannungen .....	36
2.8.2 Betrachtung des energetischen Aspekts .....	38
2.8.3 Das MLRB-Konzept.....	40
2.9 Gleit-Transfer-Prozesse .....	43
2.9.1 Rissinitiierung an der Korngrenze .....	44
2.9.2 Rissausbreitung über Korngrenzen.....	48
2.9.3 Berücksichtigung der Korngrenzenlage .....	52
<b>3 Zielsetzung</b> .....	<b>55</b>
<b>4 Die <i>STRONG</i>-Methode</b> .....	<b>60</b>
4.1 Erfassung der Gleitsystemkopplungen .....	64
4.2 Darstellung der Kopplungsmatrix .....	68
4.3 Berücksichtigung der Korngrenzenorientierung .....	70

---

4.4	Berücksichtigung der Schmidfaktor-Kopplung.....	72
4.5	Reduktion auf die $\varepsilon$ -Abhängigkeit.....	75
4.6	Zusammenfassung des Anwendungsprinzips.....	78
<b>5</b>	<b>Ergebnisse .....</b>	<b>81</b>
5.1	Gleitlinientransmission im statischen Zugversuch .....	81
5.1.1	Einzelfallbetrachtung: Blockade und Transfer .....	86
5.1.2	Fehlpassungs-Map des Gesamtgefüges .....	89
5.2	Gleitsystemkopplung bei Zwillingskorngrenzen.....	95
5.2.1	Fall 1: Quergleitung (Cross slip) .....	97
5.2.2	Fall 2: Gleitung parallel zur Zwillingsebene .....	99
5.2.3	Fall 3: Gleitungsinkompatibilität in der Zwillingskorngrenze .....	100
5.2.4	Klassifizierung der Zwillingskorngrenzen .....	104
5.3	Transmissions-/Blockierungswirkung in Abhängigkeit der Korngrenzenorientierung.....	110
<b>6</b>	<b>Diskussion.....</b>	<b>119</b>
6.1	Fehlpassung bei teilweiser oder vollständiger Unkenntnis der Korngrenzenorientierung.....	119
6.1.1	Unkenntnis des Tiefenverlaufs der Korngrenze .....	119
6.1.2	Unkenntnis beider Parameter .....	126
6.2	Definition der fundamentalen Passung.....	127
6.3	Versetzungsmechanismen und Schädigung im Spezialfall der Zwillingskorngrenzen.....	134
6.4	Riss-Transfer in Abhängigkeit der Korngrenzenlage.....	140
6.4.1	Der kontinuierliche Riss-Transfer .....	140
6.4.2	Der diskontinuierliche Riss-Transfer .....	141
6.4.3	Einfluss des Restburgersvektors.....	143
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>146</b>
7.1	Zusammenfassung .....	146
7.2	Ausblick.....	149
	<b>Anhang: Probenherstellung, Präparation und Charakterisierung.....</b>	<b>151</b>
	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>154</b>
	<b>Lebenslauf: .....</b>	<b>159</b>
	<b>Erklärung .....</b>	<b>160</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1-1: Alltagsexperiment – Biegung einer Büroklammer .....	2
Abb. 1-2: Eisenbahnunfall auf der Dee-Brücke 1847 [ <b>Lewi04</b> ] .....	3
Abb. 1-3: Rissinitiierung an einer Zwillingsgrenze in Kupfer, beobachtet im Seitenschliff [ <b>Veho04</b> ] .....	4
Abb. 1-4: Rissinitiierung an einer Pore in einer Nickelbasis-Superlegierung .....	4
Abb. 1-5 MD Simulation einer Versetzungstransmission [ <b>Jin08</b> ] .....	5
Abb. 1-6: Blackbox-Konzept für den Prozess der Versetzungstransmission .....	6
Abb. 1-7: Prinzip der <i>STRONG</i> -Methode zur Bewertung der einzelnen Korngrenzen hinsichtlich ihrer Neigung den Transport von Gleitung zu erlauben oder zu blockieren mit der damit verbundenen Entstehung von Schädigung (Aufreißen des Gleitbandes oder der Korngrenze) .....	7
Abb. 2-1: a) Netzwerk sämtlicher Korngrenzen und b) Korngrenzencluster zusammenhängender (nicht-spezzieller) Großwinkelkorngrenzen [ <b>Schu03</b> ] .....	9
Abb. 2-2: a) Ausbildung von Makro-Scherbändern [ <b>Guil09</b> ] und b) Korncluster innerhalb derer sich die plastische Deformation über mehrere Körner hinweg erstreckt [ <b>Abuz12a</b> ] .....	9
Abb. 2-3: Schematische Darstellung der Spannungsanteile bestehend aus (grau) globaler Spannung, (blau/rote Pfeile) elastische Zug-/Druck-Inkompatibilitätsspannungen an der Korngrenze, sowie die Spannungsverteilung einer Versetzungsanordnung .....	12
Abb. 2-4: Darstellung der Kristallorientierung als gedrehter Würfel .....	13
Abb. 2-5: Prinzip der stereographischen Projektion eines facettierten Kubus .....	15
Abb. 2-6: Blick auf die Äquatorialebene nach der Projektion .....	15
Abb. 2-7: Standard Dreieck (SST) .....	16
Abb. 2-8: Farbcodierung der Orientierung .....	16
Abb. 2-9: Schema Orientierungsmatrix und Miller-Indizierung .....	16
Abb. 2-10: Definition der Missorientierung $\Delta R$ zwischen zwei Würfeln A und B .....	17
Abb. 2-11: Schematische Darstellung der möglichen Drehoperationen der Würfelsymmetrie .....	18
Abb. 2-12: Beispiel einer speziellen Missorientierungsbeziehung aus zwei Blickrichtungen .....	19
Abb. 2-13: Blick in 111-Richtung, Axis-Angle-Perspektive .....	20
Abb. 2-14: Missorientierungsverteilung ultra-feinkörniger Cu-Al und Cu-Zn Legierungen [ <b>Sarm08</b> ] .....	21
Abb. 2-15: Mackenzie-Plot statistisch verteilter Kristallorientierungen in kubischer Symmetrie [ <b>Mack58</b> ] .....	21
Abb. 2-16: CSL- $\Sigma 7$ Missorientierung mit $38,2^\circ$ Drehung um die Achse 111 .....	22
Abb. 2-17: CSL- $\Sigma 3$ Zwillingsorientierung .....	22
Abb. 2-18: Darstellung der Gleitsystemcharakteristik .....	24
Abb. 2-19: Thompson Tetraeder mit der Versetzungsreaktion gemäß Gl.(10) .....	25
Abb. 2-20: Aufgefalteter Thompson Tetraeder .....	25

Abb. 2-21: Blick auf die (111)-Ebenen im kfz-Gitter (roter Pfeil: vollständige Versetzung, gelber Pfeil: Shockley Partialversetzung).....	25
Abb. 2-22: Blick entlang der (111)-Ebenen (links: ungestörte Stapelfolge, rechts: gestörte Stapelfolge infolge eines Stapelfehlers) .....	25
Abb. 2-23: HRTEM-Aufnahme einer (112) und (111) $\Sigma$ 3 Korngrenze in polykristallinem Si [ <b>Saka07</b> ] .....	26
Abb. 2-24: Grobkörniges Gefüge einer Flachzugprobe (P2) aus reinem Nickel.....	27
Abb. 2-25: Schematische Darstellung der geometrischen Gegebenheiten zweier benachbarter Kristallorientierungen A und B, die durch die Korngrenze voneinander getrennt sind. ....	28
Abb. 2-26: Planarer Versetzungs-Pileup vor einer Korngrenze [ <b>Bran04</b> ].....	29
Abb. 2-27: TEM-Aufnahme transmittierender Versetzungen und Schema der vier Mechanismen nach Shen et al. [ <b>Shen88</b> ].....	30
Abb. 2-28: Cross-Slip durch eine Zwillingskorngrenze .....	31
Abb. 2-29: Transmission unter Erzeugung eines Restburgersvektors .....	31
Abb. 2-30: links: Schema nach [ <b>Shen88</b> ], rechts: Nomenklatur der beteiligten Winkel.....	33
Abb. 2-31: Spannungsfeld (DDD-Simulation) einer Versetzung im Abstand vor einer Korngrenze. Farbskala: Spannungserhöhung (rot) –Verminderung (blau) [ <b>More08</b> ] .....	35
Abb. 2-32: Spannungsfeld Einfacher Pile-Up vor einer Korngrenze bestehend aus 144 Versetzungen (von links kommend) [ <b>Scho10</b> ] .....	35
Abb. 2-33: Simulation der Inkompatibilitätsspannungen eines Bikristalls infolge der elastischen Anisotropie [ <b>Wels11</b> ] .....	36
Abb. 2-34: Gleitlinien in der Nähe der Korngrenze eines Fe3%Si-Bikristalls [ <b>Hirt72</b> ].....	36
Abb. 2-35: Korngrenzenenergie als Funktion des Twistwinkels für Nickel in $\langle 111 \rangle$ Orientierung [ <b>Sang10a</b> ] .....	38
Abb. 2-36: Energiebarriere für Gleitung durch die Korngrenze für verschiedene CSL-Typen [ <b>Sang11a</b> ].....	38
Abb. 2-37: Vergleich von LRB-Konzept und Energie-Konzept [ <b>Sang11a</b> ] .....	40
Abb. 2-38: a) Transmission von Gleitung durch eine Zwillingskorngrenze in grobkörnigem Nickel (Probe P3), sowie b) Blockierungswirkung ein $\Sigma$ 17b Korngrenze in ultrafeinkörnigem Nickel (Probe P4).....	43
Abb. 2-39: Schematische Darstellung der Wechselwirkung von PSB-Strukturen mit Korngrenzen [ <b>Sang11c</b> ].....	44
Abb. 2-40: Aufreißen der Korngrenze infolge von Extrusionen durch PSBs [ <b>Zhan11</b> ].....	44
Abb. 2-41: a) Passieren der Korngrenze [ <b>Zhan11</b> ] und b) Blockierung der PSBs an der Korngrenze [ <b>Zhan00b</b> ].....	46
Abb. 2-42: Rissinitiierung durch Aufreißen (a) der Korngrenze oder (b) eines PSB [ <b>Li13</b> ] .....	47
Abb. 2-43: Schematische Konfiguration bestehend aus Risskerbe, Risspitze a, plastischer Zone p und der Versetzungsdichteverteilung $D(x)$ im Fall des sogenannten „Equilibrium Slip Band“ (ESB-Fall), also einem	

Gleichgewichtszustand, der sich gemäß Gleichung (25) noch ohne Einfluss der Korngrenze zum Nachbarkorn (grün) einstellt .....	48
Abb. 2-44: BSB-Fall: Blockierung der plastischen Zone p durch die Korngrenze verbunden mit einem Pile-Up der Versetzungsdichtefunktion $D(x)$ .....	50
Abb. 2-45: (links) Schematische Darstellung der Rissausbreitungskurve in Abhängigkeit von $\Delta K$ einschließlich der fluktuierenden Geschwindigkeit im Bereich Stage I. ....	51
Abb. 2-46: Schematische Darstellung der geometrischen Verhältnisse zweier Gleitsysteme, die auf einer Korngrenze miteinander koppeln [Wern89] .....	53
Abb. 3-1: Erfassung des Probengefüges (Korngrenzen und Kornorientierungen) mittels Lichtmikroskop und EBSD (Probe P3).....	56
Abb. 3-2: Schematische Darstellung der Linearisierung und Klassifizierung der einzelnen Korngrenzen. (links): Korngrenzenetzwerk, (mitte): Linearisierung mittels Verbindung der Tripelpunkte, (rechts): Farbcodierung entsprechend der nachbarschaftlichen Missorientierung .....	57
Abb. 3-3: Beschreibung des Korngrenzencharakters durch dessen Fehlpassung anstelle der konventionellen Fehlorientierung.....	58
Abb. 3-4: Auftreten von Gleitlinientransmission durch Großwinkelkorngrenzen (P2).....	58
Abb. 4-1: Schematische Darstellung der <i>STRONG</i> -Methode, sowie der 3D-Konfiguration .....	60
Abb. 4-2: Abhängigkeit der $\alpha$ -Passung von der Korngrenzenlage.....	61
Abb. 4-3: Vollständige Erfassung und Abbildung der dreidimensionalen geometrischen Gesamtkonfiguration .....	64
Abb. 4-4: Verbesserte Darstellung der Gleitsystemkopplungsmatrix mittels Farbcodierung .....	66
Abb. 4-5: Visualisierung und quantitative Erfassung der Gleitebenenschnitte und der Gleitrichtungskopplungen. Großbuchstaben identifizieren die Ebenen aus Korn A (rot), die Kleinbuchstaben aus Korn B (grün). Die mit Groß-R bzw. klein-r adressierten Felder beziehen sich auf die korrespondierenden Gleitrichtungskopplungen. In Kombination von Gleitebenen E/e und Gleitrichtungen R/r werden mittels den Indizes i und j die 144 möglichen Gleitsystemkopplungen adressiert. ....	68
Abb. 4-6: Farbcodierung entsprechend des $\omega$ -Grenzwertes von 0,067 (vor dem Hintergrund des eingeführten Grenzwertes für $\alpha = \beta = 15^\circ$ ) mit dem Ziel den Blick auf die tatsächlich für eine Transmission in Frage kommenden Gleitsystemkopplungen zu lenken (hier: $i = 11, j = 11$ ).....	69
Abb. 4-7: Bei variabler Korngrenzenorientierung wird jeder Matrixeintrag zu einer Funktion der Korngrenzenparameter $\delta$ und $\varepsilon$ .....	70
Abb. 4-8: 2D-Kacheldarstellung der Kopplungsfunktion in Abhängigkeit von $\delta$ und $\varepsilon$ .....	71
Abb. 4-9: Ganzheitliche Erfassung aller Gleitsystemkopplung für alle Korngrenzenorientierungen mittels der sog. Farbkachelmatrix.....	72
Abb. 4-10: Berechnung der 144 Schmidfaktorkopplungen als Kombination der je 12 einzelnen Schmidfaktoren aus Korn A und Korn B. Zur Vermeidung von Fehlinterpretationen bezüglich der Farblogik seien die	

Schmidfaktorkopplungen im Folgenden zusätzlich durch eine kontinuierliche Graustufencodierung hervorgehoben.....	73
Abb. 4-11: Eingrenzung der Farbkachelmatrix durch Ausblenden der inaktiven Kopplungen.....	73
Abb. 4-12: Eingrenzung der möglichen Korngrenzenorientierung durch Bestimmung des durch den Verlauf der Korngrenzenlinie erfassbaren Twistwinkels $\delta$ .....	74
Abb. 4-13: Schematische Darstellung der Reduktion der Korngrenzenorientierung von zwei Parametern $\delta$ und $\varepsilon$ , auf eine reine $\varepsilon$ -Abhängigkeit, für zwei beispielhaft gewählte Twistwinkel $\delta = 60^\circ$ bzw. $\delta = 155^\circ$ bei sonst völlig identischen Rahmenbedingungen. ....	75
Abb. 4-14: Wechsel der Farblogik (von grün-gelb-rot zu weiß-blau) nach der Reduktion auf nur noch eine Variable $\varepsilon$ .....	76
Abb. 4-15: Darstellung der Gesamtmatrix als Reduktion der Farbkachelmatrix für einen bestimmten Wert $\delta$ .....	76
Abb. 4-16: Anwendungsprinzip der <i>STRONG</i> -Methode (linke Seite) Inputdaten: die Kornorientierungen A und B, die Orientierung (räumliche Lage) der Korngrenzenebene $\delta$ und $\varepsilon$ , abhängig davon ob die Parameter bekannt sind oder nicht, gehen sie als konkrete Werte ein oder bleiben variabel (symbolisiert durch die Fragezeichen), die Zugrichtung definiert die Verteilung der Schmidfaktoren auf den einzelnen Gleitsystemen, (rechts) mögliche Szenarien:.....	78
Abb. 4-17: Darstellung der Kopplungsmatrizen für die Szenarien (I), (II), (II), sowie der Schmidfaktorkopplungen. Beispielhaft ist Kachel (9-4) aufgeführt, in der bei Kenntnis beider Parameter, mit einem Wert von 0,04, die beste geometrische Gleitsystempassung zu finden ist, wenngleich für diese Kopplung nur eine äußerst geringe gemeinsame Gleitsystemaktivität ausgewiesen wird. Die Kopplung (1-9) erfüllt hingegen beide Kriterien. (Passung: 0,05 und Aktivität: 0,17).....	79
Abb. 4-18: Nachbildung des realen Szenarios zur Veranschaulichung der für den Gleittransfer relevanten Gleitsystemkopplung.....	80
Abb. 5-1: (links) Probengeometrie und Abmessungen, (rechts) Zugkurve der Probe P1.....	81
Abb. 5-2: Erfassung aller Körner und Korngrenzen mittels Nummerierung.....	82
Abb. 5-3: Plausibilisierung der Annahme im Tiefenverlauf senkrechter Korngrenzen.....	83
Abb. 5-4: Darstellung der einzelnen Korngrenzen bzgl. ihres Charakters (Kleinwinkel, Großwinkel bzw. spezieller Winkel inkl. CSL- $\Sigma$ -Beziehung).....	83
Abb. 5-5: Mackenzie-Plot der 104 betrachteten Korngrenzen.....	84
Abb. 5-6: Visualisierung der einzelnen nachbarschaftlichen Missorientierungen durch die sogenannten Miss- bzw. Fehlorientierungs-Map.....	85
Abb. 5-7: Experimentelle Bestätigung des Fehlpassungscharakters. Ein großer Korngrenzenwiderstand ( $0,25 \gg 0,067$ ) verhindert die Transmission (Nachbarschaft A-C), ein Widerstandswert unterhalb des Grenzwertes ( $0,03 < 0,067$ ) erlaubt die Transmission (A-B).....	86

Abb. 5-8: Verknüpfende Betrachtung von Gleitsystem- und Schmidfaktorkopplungsmatrix zur Prüfung, ob Kompatibilität und Aktivität in Einklang stehen, was hier nicht der Fall ist. ....	87
Abb. 5-9: Vergleichende Betrachtung von Passungs- und Aktivitätsmatrix. Zwei Gleitsystemkopplungen (die weiß umrandeten) erfüllen beide Kriterien – gemeinsame Gleitsystemaktivität verbunden mit geometrisch günstiger Passung. Bei allen anderen Kopplungen treffen entweder Aktivität auf schlechte Passung, gute Passung auf Inaktivität oder aber, dass keines der beiden Kriterien erfüllt wird. ....	88
Abb. 5-10: Auftragung des jeweils kleinsten $\omega$ -Wertes (aus der jeweiligen $\omega$ -Matrix), der 104 betrachteten Korngrenze, aufgelistet nach deren Fehlorientierung .....	89
Abb. 5-11: Auftragung des jeweils kleinsten Kopplungswiderstandes für den das Aktivitätskriterium $SFK \geq 0,09$ erfüllt ist .....	91
Abb. 5-12: Ausprägung der Korngrenzentopographie infolge des unterschiedlichen Passungscharakters. Stetiger Gleittransfer bei guter Passung (1) und (2), sowie massive Verwerfungen infolge von Versetzungsaufstauungen bei (3) und (4) .....	92
Abb. 5-13: Vergleich zwischen der berechneten Transmissionstendenz der einzelnen Korngrenzen mit dem tatsächlich auftretenden Deformationsverhalten in Korngrenzenumgebung .....	94
Abb. 5-14: (links) allgemeiner Fall: die zwei die Kristallorientierung repräsentierenden Tetraeder (rot und grün) liegen willkürlich bzgl. der Korngrenzebene (beige); .....	95
Abb. 5-15: (links) allgemeiner Fall der regellosen Verteilung der Gleitlinienschnitte in der Korngrenzebene, während (rechts) die Schnittlinien in der gemeinsamen Zwillingsenebene hochsymmetrisch ( $60^\circ$ ) angeordnet liegen. ....	96
Abb. 5-16: Interpretation des Gleitebenen-Schnittbildes (rechts) mit der Gleitsystemkopplungsmatrix einschließlich der Identifikation der jeweiligen Gleitebenenpaare .....	97
Abb. 5-17: Zwillingsbeziehung A-B mit kohärenter Korngrenze entlang der gemeinsamen Zwillingsenebenen K und k mit beidseitigem Gleitlinientransfer der Ebenen L und n .....	98
Abb. 5-18: Verknüpfung der Kopplungsmatrizen zur Identifikation der aktiven Quergleitkopplung $L2n6$ für die Zwillingsbeziehung AB (Korn 29 und 28 in Probe P3) .....	98
Abb. 5-19: 3D-Visualisierung der Quergleitkopplung mit den beteiligten und identischen Burgersvektoren $R2$ und $r6$ , sowie den beteiligten Gleitebenen L (rot) und n (grün) .....	99
Abb. 5-20: Die hauptaktive Gleitung (Gleitlinien im rechten Bild) erfolgt auf den (Zwillings)-Ebenen, die parallel zur Zwillingskorngrenze (gelb) verlaufen - (Korn 35 und 38) in Probe P2 .....	99
Abb. 5-21: Die hauptaktiven Schmidfaktorkopplungen fallen teilweise mit geometrisch ungünstigen Passungen zusammen, aber auch mit der Zwillingsenebene selbst, was die Gleitung parallel und entlang dieser beiden gemeinsamen Ebene erklärt. Die drei außerhalb der Zwillingsenebene liegenden (Quergleit)-Kopplungen bleiben inaktiv .....	100

Abb. 5-22: Zwei links- und rechtsseitig der Zwillingskorngrenze hauptaktive und gleichzeitig geometrisch äußerst unpassende Gleitsysteme treffen auf der Korngrenzebene aufeinander, mit der Folge der Initiierung eines Ermüdungsrissses - (Korn 35 und 38) in Probe PW.....	101
Abb. 5-23: 3D-Visualisierung der in Abb. 5-22 gezeigten Gleitsystemkopplung N4k2.....	101
Abb. 5-24: Die Gleitsystemkopplung N4k2 weist mit einem Wert von 0,22 die höchste Schmidfaktorkopplung bei gleichzeitig äußerst ungünstiger Passung (0,85) auf.....	102
Abb. 5-25: Schematische Einteilung und Visualisierung der drei grundsätzlichen Kopplungsarten: Fall 1 Quergleitung, Fall 2 Gleitung parallel zur Zwillingsene und Fall 3 Gleitsystemkopplung zweier nichtpassender Gleitsysteme (Blockade).....	104
Abb. 5-26: (oben) Lichtmikroskopisches Stich-Bild der gesamten Probenoberfläche inklusive EBSD-Mapping des Stegbereichs, (unten) Einschränkung des Betrachtungsbereiches.....	105
Abb. 5-27: (links) Charakterisierung des Bildausschnitts aus Abb. 5-26 hinsichtlich der potentiellen Gleitaktivität basierend auf einem Mapping der (pro Korn maximalen) Schmidfaktoren und (rechts) Identifikation der CSL- $\Sigma$ -Beziehungen (Zwillinge rot).....	105
Abb. 5-28: (links) Kategorisierung der einzelnen Zwillingskorngrenzen bezüglich deren jeweils dominierenden Kopplungscharakters mit nebenstehender farblicher Visualisierung im Gefüge.....	106
Abb. 5-29: Visualisierung der $\Omega$ -Einteilung (vgl. Tabelle 5-2) in der Gefüge Map.....	107
Abb. 5-30: Initiierung eines Ermüdungsrissses an der Korngrenze 66 infolge der starken Ausprägung der Blockierungswirkung aufgrund der intensiven Gleitsystemaktivität.....	108
Abb. 5-31: Theoretisches Experiment einer halbseits eingeschlossenen Viertelkugel, um eine Korngrenzenfläche zu erzeugen, welche alle denkbaren Orientierungen beinhaltet.....	110
Abb. 5-32: (links) künstlich in die ursprüngliche Oberfläche eingebrachte FIB-Kerbe in definiertem Abstand vor einer Korngrenze, (rechts) Risspfad wie er sich nach einigem Oberflächenabtrag im Probeninnern zeigt (Probe P8)....	111
Abb. 5-33: (links) Absteckung des zu tomographierenden Bereichs um die FIB-Kerbe einschließlich des Risses (rechts) 3D-Rekonstruktion des Rissverlaufs im Probeninnern anhand der einzelnen Schnittbilder.....	112
Abb. 5-34: Seitliche Projektion der 3D-Rekonstruktion aus Abb. 5-33. An den Wechselwirkungsstellen 1 bis 10 wurde der Riss (bis auf Stelle 8) aufgehalten, bei den Stellen 11 bis 15 konnte er passieren.....	113
Abb. 5-35: Schematische Darstellung des Rekonstruktionsprinzips zur Bestimmung der Korngrenzenparameter $\delta$ und $\varepsilon$ .....	114
Abb. 5-36: Vergleich des tatsächlich auftretenden Transmissions- bzw. Blockierungsverhaltens mit den berechneten Widerstandswerten $\omega\delta$ , $\varepsilon$ .....	114
Abb. 5-37: (links, Stelle 8) minimaler Rissübertritt von B nach A, (rechts) deutlicher Rissstransfer von Korn B nach Korn A. In beiden Fällen kommt die geometrisch am besten passendste Kopplung zum Tragen (n4 mit N4).....	115
Abb. 5-38: Übersicht des gesamten Riss-Transfer-Prozesses von Korn B nach Korn A in der folgenden Abfolge: n4 Stage I Mikrorisswachstum, Passieren der	

Korngrenze unter Benutzung der günstigsten Kopplung $n4N4$ , danach alternierende Ausbreitungen auf den Ebenen N und L, um schließlich wieder zu kristallographischem Wachstum (Stage I) auf der für Korn A optimalen Gleitebene L zu wechseln. ....	116
Abb. 6-1: Interpretation verschiedener charakteristischer Funktionsverläufe für $\omega\varepsilon$ ..	120
Abb. 6-2: (links) alle Werte $\varepsilon$ führen zu hohen Widerstandswerten, (rechts) in 95% der Fällen liegen die Widerstandswerte unterhalb des Grenzwerts, entsprechend hoch die Wahrscheinlichkeit, dass eine willkürliche Tiefenneigung tatsächlich in einer solchen Lage vorzufinden ist. ....	121
Abb. 6-3: Vergleich der Fehlpassungs-Maps mit und ohne Kenntnis von $\varepsilon$ . Farbcode der Korngrenzen: (schwarz) Barrierecharakter, (hellgrün) Transmission in Theorie und Experiment, (hellrot) nur theoretisch vorliegende Transmissionstendenz, da keine Gleitlinientransferprozesse feststellbar .....	122
Abb. 6-4: Veranschaulichung der Übereinstimmung der jeweiligen Vorhersagen bezüglich der Tendenz zur Gleittransmission und dessen tatsächliches Auftreten für beide Szenarien bzgl. der Kenntnis des Parameter $\varepsilon$ (vgl. Abb. 6-3). Für 93 der insgesamt 104 Korngrenzen sind die mittels <i>STRONG</i> kalkulierten Vorhersagen identisch (vgl. Balken in der Mitte).....	123
Abb. 6-5: Variation von $\delta$ mittels gekrümmten Korngrenzenverlaufs: a) Hauptaktive und nebenaktive Gleitlinien, b) Kopplung der nebenaktiven Gleitsysteme $N1-m1$ , .....	124
Abb. 6-6: (links) Binäre Reduktion der Farb(verlaufs)kachel aus Abb. 6-5 in „passend“ und „nicht passend“ für alle denkbar möglichen Korngrenzenkonfigurationen. ....	125
Abb. 6-7: (links) Farbkachelmatrix $\omega_{ij}\delta, \varepsilon$ und deren Reduktion zu $\Pi_{ij}\delta, \varepsilon$ .....	126
Abb. 6-8: Reduktion der Widerstandsmatrix zur Passungsmatrix und schließlich zur fundamentalen Passung $\Pi$ .....	128
Abb. 6-9: Auftragung der fundamentalen Gesamtpassung der 104 Korngrenzen, sortiert nach deren Fehlorientierung .....	129
Abb. 6-10: Mackenzie-Plot von 10.000 statistisch berechneten Nachbarschaften.....	130
Abb. 6-11: Fundamentale Passung $\Pi$ von 820 simulierten Nachbarschaften, aufgetragen über deren Fehlorientierung .....	130
Abb. 6-12: Reproduktion des grundsätzlichen Kurvenverlaufs aus Abb. 6-11 durch Mittelung der Passungswerte mit $1^\circ$ -scharfer Unterteilung.....	131
Abb. 6-13: Passungswerte von 32 ausgewählten CSL- $\Sigma$ -Beziehungen.....	132
Abb. 6-14: Gleittransfer eines persistenten Gleitbandes durch eine $\Sigma 19b$ Korngrenze (Missorientierung $46,8^\circ$ ) [ <b>Zhan03</b> ] .....	133
Abb. 6-15: Gleittransmission durch einen inkohärenten Abschnitt 112 einer Zwillingskorngrenze (GB 69 in Probe 3).....	134
Abb. 6-16: Klassifizierung der möglichen Gleitrichtungskopplungstypen nach Analyse der Restburgersvektoren $r_{res}$ (RBV), deren Beträge, sowie ihrer Lage zur gemeinsamen Zwillingsenebene.....	135
Abb. 6-17: Klassifizierung der 36 möglichen geometrischen Versetzungsreaktionen. 136	
Abb. 6-18: Charakterisierung der Versetzungsreaktionen an den bereits als blockierend identifizierten Zwillingskorngrenzen und Bewertung der Schädigungstendenz.....	137

Abb. 6-19: a) Transmission persistenter Gleitbänder (PSBs) durch die Zwillingskorngrenze (TB) und b) schematische Darstellung des Transmissionsprozesses durch Quergleitung [Li13].....	138
Abb. 6-20: FIB-Tomographie [Schäf10] und Visualisierung mittels <i>STRONG</i> , kontinuierlicher Riss-Transfer .....	140
Abb. 6-21: (links oben) FIB-Tomographie [Schäf10] diskontinuierlicher Riss-Transfer, (rechts oben) Visualisierung der geometrischen Konfiguration, (links unten) Schnittkopplungen in der Korngrenzenebene, (rechts unten) Zick-Zack-Verlauf des Risspfades infolge der alternierenden Benutzung zweier Gleitsysteme .....	142
Abb. 6-22: Berechnung der „Passung“ des Restburgersvektor in die Korngrenzenebene anhand des Winkel $\vartheta$ zwischen Restburgersvektor und Korngrenze. Die Kachel (rechts) zeigt die Variation dieser Passung in Abhängigkeit der Korngrenzenparameter $\delta, \epsilon$ .....	143
Abb. 6-23: Die Berücksichtigung der „Einpassung“ des Restburgersvektors in die Korngrenze führt zu einer genaueren Eingrenzung der tatsächlichen Transmissionsaffinität.....	144
Abb. 6-24: Diagramm (b): Auftragung der über die Korngrenze hinweg akkumulierten Dehnung in Abhängigkeit vom Betrag des Restburgersvektors [Abuz12b]. a) und c) Visualisierung der Dehnung mittels DIC-Messungen [Patr13]. .....	145
Abb. 7-1: a) AFM-Aufnahme der Gleitbandspitze unmittelbar vor der Korngrenze. b) REM-Aufnahme einer beispielhaften Untersuchungskonfiguration, bestehend aus FIB-Kerbe, Gleitband (plastische Zone) und Korngrenze. c) Schema zur Vermessung des Gleitbandprofils. d) Berechnung der Versetzungsdichte anhand des Gleitbandprofils. ....	149
Abb. 7-2: a) Visualisierung der Verschiebungsvektoren (gelb) mittels Bildkorrelation, b) Berechnung der daraus resultierenden Dehnung $\epsilon_{xx}$ , c) Konzentration der plastischen Zone im Gleitband vor der Risspitze und d) Sichtbarmachung mittels DIC .....	150

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Die 23 nichttrivialen Drehoperationen der Oktaedergruppe in Matrizenform .....	19
Tabelle 2-2: CSL-Beziehungen sortiert nach $\Sigma, \theta$ und UVW .....	23
Tabelle 2-3: Nomenklatur .....	24
Tabelle 5-1: Detaillierte Analyse der vier in Abb. 5-12 gezeigten Kopplungsfälle .....	92
Tabelle 5-2: Ermittlung des Korngrenzenwiderstandes $\Omega$ in Abhängigkeit der SFK-Aktivität.....	107

# Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

## Abkürzungen

A, B	Korn A bzw. B
APB	Anti Phase Boundary (Antiphasengrenze)
BCS	Bilby, Cottrell und Swinden (Riss-Modell)
BSB	Blocking Slip Band (blockiertes Gleitband)
CSL	Coincident Site Lattice
CTB	Coherent Twin Boundary (kohärente Zwillingskorngrenze)
DDGBI	Dislocation Density Grain Boundary Interaction
DFZ	Dislocation Free Zone (Model)
EBSD	Electron Back Scatter Diffraction
ESB	Equilibrium Slip Band (Gleitband im Gleichgewichtszustand)
FIB	Focussed Ion Beam
GB	Grain Boundary (Korngrenze)
GBD	Grain Boundary Dislocation (Korngrenzenversetzung)
GBE	Grain Boundary Engineering
GBN	Grain Boundary Number (Korngrenzennummerierung)
GR	Gleitrichtung
HAGB	High Angle Grain Boundary (Großwinkelkorngrenze)
K,L,M,N	Gleitebenen von Korn A (bzw.: k,l,m,n von Korn B)
LAGB	Low Angle Grain Boundary (Kleinwinkelkorngrenze)
LRB	Lee, Robertson und Birnbaum (Geometrie-Konzept)
MLRB	Modified LRB Concept
<i>mSIF</i>	mikroskopischer Spannungsintensitätsfaktor
<b>0432</b>	Symmetrioperationen der Oktaedergruppe
OGM	Orientation Gradient Mapping

PSB	Persistent Slip Band (persistentes Gleitband)
QG	Quergleitung
RBV	Restburgersvektor
$\Sigma$	Sigma-Wert bzgl. einer CSL-Symmetriebeziehung
SF	Stacking Fault (Stapelfehler)
SST	Standard Stereographic Triangle (stereographisches Standarddreieck)
<i>STRONG</i>	Slip Transfer Resistance Of Neighboring Grains
TB	Twin Boundary (Zwillingskorngrenze)
TEM	Transmission Electron Microscopy
HRTEM	High Resolution Transmission Electron Microscopy
ZWG	Zwillingsgleitung (parallel oder entlang der Zwillingskorngrenze)

## Mathematische Symbole

$\alpha$	Schnittwinkel zweier Gleitebenen auf der Korngrenze
$a$	(An)risslänge
$\beta$	Winkel zwischen zwei Gleitrichtungen
$\vec{b}_r$	Restburgersvektor
$c$	Risslänge
$\delta$	Twistwinkel der Korngrenze
$D(x)$	Versetzungsdichteverteilung
$\frac{da}{dN}$	Rissausbreitungsgeschwindigkeit
$\varepsilon$	Tiltwinkel der Korngrenze
$\vec{E}$	Gleitebene bzw. deren Normalenvektor
$\varphi_1, \Phi, \varphi_2$	Eulerwinkel-Tripel
$\Phi_1, \varphi, \Phi_2$	Eulerwinkel-Tripel (z.B. des Nachbarkorns)
$(hkl)\langle uvw \rangle$	Darstellung der Orientierung mittels Millerscher Indizes

$i$	Indizierungssymbol (zur Adressierung eines konkreten Gleitsystems)
$\Delta K$	Spannungsintensitätsfaktor
$\Delta K^m$	mikroskopischer Spannungsintensitätsfaktor
$\lambda$	Gleitüberföhrungszahl
$M_{IJ}$	Transmissionfaktor bzgl. der Gleitsysteme $I$ und $J$
$\min(\omega_{ij})$	geometrisch günstigste Gleitsystemkopplung
$\vec{n}(\delta, \varepsilon)$	Korngrenzennormalenvektor
$p$	Länge der plastischen Zone
$\Pi$	fundamentale Passung
$\Pi_{ij}$	Passungsmatrix
$\rho_{in}$	incoming dislocation density
$\rho_{out}$	outgoing dislocation density
$\vec{r}$	Gleitrichtung
$\mathbf{R}$	Rotationsmatrix
$\Delta \mathbf{R}$	Missorientierungsmatrix
$\theta$	Missorientierungswinkel
$\sigma$	Hauptspannung
$S_{ijkl}$	Steifigkeitsmatrix
$SF$	Schmidfaktor
$SFK$	Schmidfaktorkopplung
$\tau$	Schubspannung
$\vartheta$	Einpassung des Restburgersvektors in die Korngrenzenebene
$t(\alpha, \beta)$	Transmissionsfaktor in Abhängigkeit der Korngrenzenorientierung
$\langle UVW \rangle$	Richtungssachse bzgl. Axis-Angle-Darstellung
$\omega$	geometrischer Korngrenzenwiderstand (reine Gleitsystempassung)
$\Omega$	(mit Gleitaktivität) gewichteter geometrischer Korngrenzenwiderstand
$\vec{Z}$	Zugachse

## Danksagung

*„Dankbarkeit ist das Eingeständnis unserer Abhängigkeit von anderen.“*

*Erhard Blanck (\*1942)*

Nach dem Diplom in Physik, 2009 in Karlsruhe, fand ich, zurückgekehrt in meine Heimat, das Saarland, in Prof. Dr. Horst Vehoff einen Doktorvater, der mir auf dem Weg zur Promotion zugleich Kompass und Leuchtturm in einem war. Er gab mir stets Freiraum für kreative Ideen und auch den Mut neue Wege zu gehen, ohne jedoch den Blick für das Ziel zu verlieren. Hierfür, für die Begleitung meiner Arbeit und die vielen lehrreichen Gespräche bin ich über alle Maßen dankbar.

In besonderer Schuld stehe ich bei Dr. Michael Marx, der meine Doktorarbeit als permanenter Ansprechpartner vom Anfang bis zum Ende mit enormem Engagement betreut und unterstützt hat. Die letzten vier Jahre waren geprägt durch eine intensive und sehr freundschaftlich-vertrauensvolle Zusammenarbeit, die mir dauerhaft in Erinnerung bleiben wird.

Ebenfalls zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen hat der rege Austausch und die Hilfsbereitschaft zwischen den gegenwärtigen, aber auch ehemaligen Kollegen und Mitarbeitern des Lehrstuhls, einschließlich Herrn Prof. Dr. Christian Motz, der meine Tätigkeit am Lehrstuhl auch nach dem Ausscheiden von Herrn Prof. Dr. Horst Vehoff weiter unterstützte.

Dank für die enge und freundschaftliche Zusammenarbeit gilt vor allem meinen Mitdoktoranden Dipl.-Ing. Kerstin Schüler, M.Sc. Mohammad Zamanzade, Dr. Tao Qian, Dr. Nousha Kheradmand, M.Sc. Idriss Tiba, Dipl.-Ing. Matthias Thielen, sowie Dipl.-Ing. Florian Schäfer.

Ebenso Dankbar bin ich für die in Rat und Tat kräftige Unterstützung ehemaliger Doktoranden des Lehrstuhls: Dr. Wolfgang Schäf, Dr. Mark Henning, Dr. Markus Welsch, Dr. Camille Perrin und Dr. Afrooz Barnoush.

Für stets schnelle und engagierte Hilfe in Sachen Organisation, IT, Probenpräparation, Maschinen und technischen Lösungen bedanke ich mich bei: Elisabeth Ohm, Diana Born, Andreas Kirsch, Rita Maron, Peter Limbach und Stefan Schmitz.

Einen nicht wegzudenkenden Beitrag, nicht nur was die Probenpräparation und experimentelle Messungen angeht, sondern auch in Form von Anregungen und Denkanstößen verdanke ich meinen Diplomanden, Bachelor-/Masteranden, Studienarbeitern und Hilfswissenschaftlern: Dipl.-Ing. Florian Schäfer, Dipl.-Ing. Kerstin Domin, Michael Bick, Coralie Alazet, Dominic Ries, sowie Loriane Prato.

Auch die lehrstuhlübergreifende Zusammenarbeit zeichnete sich stets durch große Hilfsbereitschaft aus. An dieser Stelle bedanke ich mich bei Dr. Flavio Soldera und Dipl.-Ing. Christoph Pauly für die Unterstützung am FIB, bei Dipl.-Ing. Jörg Schmauch für zahlreiche Messungen und Gespräche bezüglich EBSD, sowie bei Melanie Groh für ihre bibliothekarische Hilfe.

*„fili recordare quia recepisti bona in vita tua.“*

*„Gedenke, Sohn, daß du dein Gutes empfangen hast in deinem Leben.“*

*aus dem Evangelium nach Lukas – Kapitel 16, Vers 25*

Ich bedanke mich bei meinem Vater, bei meiner Oma, bei Mamie und Papou, sowie bei Cynthia und Robert.

Sie waren meinen Glück in Vergangenheit und Gegenwart.

Doch das allergrößte Glück, das der Gegenwart und der Zukunft, habe ich in zwei Menschen empfangen – meiner Frau Janine Marie und meinem Sohn Henri Lucien Knorr.

*Meinem lieben Robert.*

*Robert Sebastian*  
*24.06.1993 – 14.10.2012*

# 1 Einleitung

Noch bevor ich irgendeine Hochschule oder gar selbst eine Schule besuchte, hat mir das folgend abgebildete Alltagsexperiment, trotz Unkenntnis jedweder materialphysikalischer Grundlagen, eindrucksvoll bewiesen, dass sich ein Draht zwar in gewissem Umfang verbiegen lässt; wenn ich diesen Vorgang jedoch an ein und derselben Stelle zu oft wiederhole, der Draht bricht.

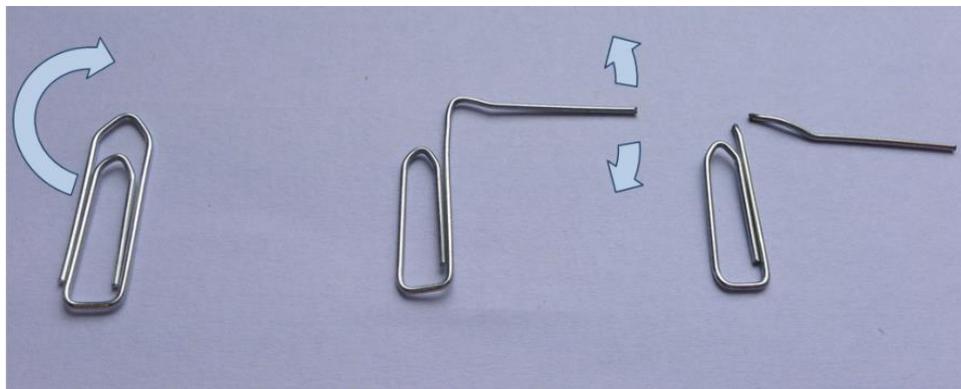


Abb. 1-1: Alltagsexperiment – Biegung einer Büroklammer

Denn es ist nicht nur der Krug, der so lange zum Brunnen geht bis er bricht. Letztlich kennt diesen Effekt jedes Kind – „Einmal gut, alles gut“. Aber für den Fall einer wiederholenden Beanspruchung, lehrt uns die mit dem Krug verbundene Lebensweisheit, dass selbst der härteste und festeste Gegenstand mit der Zeit trotz scheinbar erträglicher Belastungen letztlich irgendwann versagt. Denn steter Tropfen höhlt ebenso bekanntermaßen auch den Stein.

War es zu den Anfängen der Ingenieurwissenschaft noch die Herausforderung beispielsweise ein Bauwerk so zu konstruieren und die Festigkeit der einzelnen Elemente so zu bemessen, dass es nicht unter seiner eigenen Last zusammenbricht, so entwickelte sich erst relativ spät das Gefühl, dass jene bekannten (statischen) Festigkeiten im Falle von wechselhafter Beanspruchung oftmals nicht ausreichten, um ein Bauteil zumindest mittelfristig vor Versagen zu schützen. Diese Erkenntnisse waren wissenschaftshistorisch oftmals eng mit katastrophalen Ereignissen verbunden. So kam es zum Beispiel am 24. Mai 1847 in der englischen Stadt Chester zum Einsturz einer Eisenbahnbrücke, mit der Folge, dass ein gerade darüberfahrender Zug in den darunter verlaufenden Fluss stürzte. Fünf Menschen kamen zu Tode, neun wurden schwer verletzt.

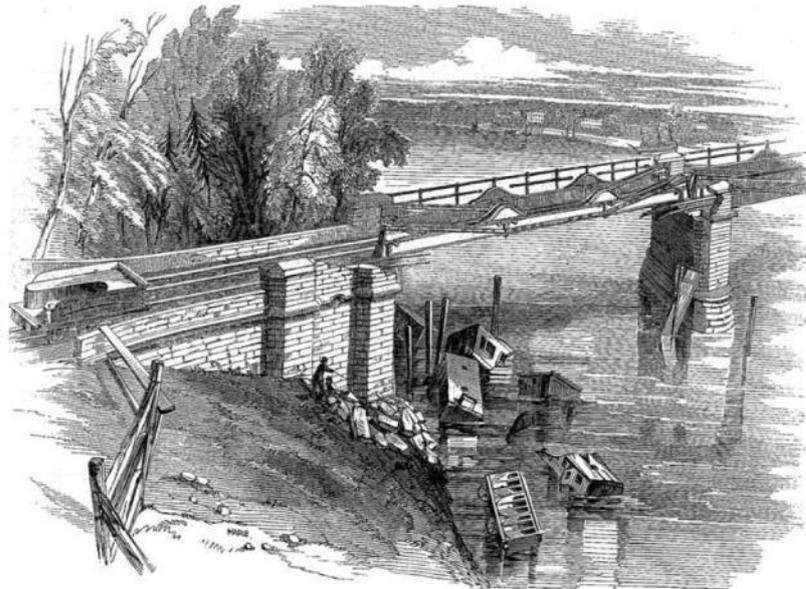


Abb. 1-2: Eisenbahnunfall auf der Dee-Brücke 1847 [Lewi04]<sup>1</sup>

Die Schadensanalyse ergab, dass gusseiserne Verankerungselemente, die zur Verstärkung von schmiedeeisernen Tragelementen eingesetzt wurden, infolge der wiederholenden Belastungen versprödeten, was an dem Unglückstag schließlich zu einem Bruch führte [Lewi04].

In dieser Zeit, dem Eisenbahnzeitalter, kam es immer wieder zu dramatischen Unfällen, sowohl bei Brücken, aber auch den Zügen selbst. Es war schließlich der deutsche Ingenieur August Wöhler, der den Zusammenhang zwischen Festigkeit und Wechselbeanspruchung erkannte und mit der Untersuchung von Eisenbahnachsen den Beginn der modernen Materialprüfung begründete.

Ein weiterer Meilenstein für die Erforschung der Materialermüdung war Anfang des 20. Jahrhunderts als der schottische Physiker und Ingenieur, Sir James Alfred Ewing, entdeckte, dass die Ursache für Ermüdungsversagen in der Existenz mikroskopisch kleiner Risse liegt. Dass „auch durch den kleinsten Riss ein Unglück eindringen kann“, schrieb – zumindest in philosophischer Erkenntnis – der indische Dichter Kālidāsa bereits im 4./5. Jahrhundert nach Christus.

Seit dieser Erkenntnis beschäftigt sich die Bruchmechanik mit den Fragen der Rissentstehung und des Risswachstums, wobei die technologische Entwicklung der letzten Jahrzehnte dazu geführt hat, dass die genannten Phänomene immer näher an dem Ort ihres Geschehens beobachtbar sind, mit der Folge ein ständig steigendes Verständnis über die werkstoffphysikalischen Mechanismen gewinnen zu können. Denn um sichere Lebensdauervorhersagen zu treffen ist die genaue Kenntnis der Rissausbreitungsgesetze

---

<sup>1</sup> „Aesthetics versus function: the fall of the Dee bridge, 1847“ P.R. LEWIS AND C. GAGG, *Interdisciplinary Science Reviews* Vol. 29, No. 2 (2004) 177-191

von größter Bedeutung. Historisch gesehen konnten solche Lebensdauermodelle stets erst in einer Größenordnung ansetzen, ab der Risse überhaupt erst sichtbar und somit detektierbar waren. Die vorher stattfindenden Prozesse spielten sich seinerzeit unweigerlich noch im Verborgenen ab und waren somit auch für modellhafte Überlegungen zunächst unzugänglich. Erst mit Beginn der voranschreitenden Entwicklung der Elektronenmikroskopie wurde auch die Beobachtung der Rissentstehung möglich, wie die beiden folgenden Abbildungen zeigen.

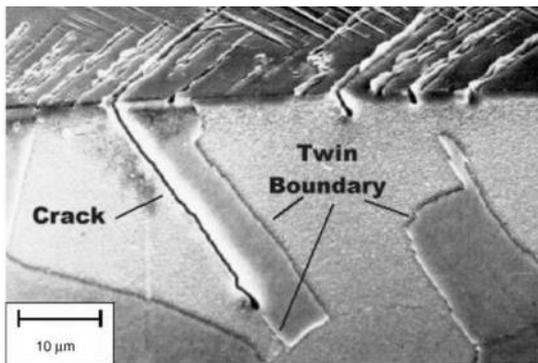


Abb. 1-3: Rissinitiierung an einer Zwillingsgrenze in Kupfer, beobachtet im Seitenschliff [Veho04]<sup>2</sup>

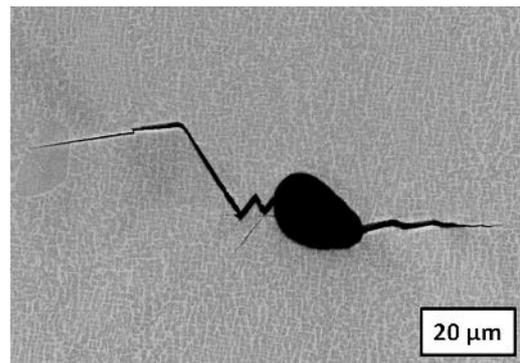


Abb. 1-4: Rissinitiierung an einer Pore in einer Nickelbasis-Superlegierung

Dass sich in Abb. 1-3 ein Riss entlang einer Zwillingskorngrenze bildet ist kein Zufall. Grundsätzlich kommen zwar alle möglichen Fehlstellen in einem realen Werkstoff in Frage, als Ausgangsort für die Entstehung eines Risses zu wirken, wie zum Beispiel auch eine Pore (vgl. Abb. 1-4). Während letztere jedoch zu den Fehlern gehört, die durch eine entsprechende Herstellung und/oder nachträgliche Behandlung bezüglich ihrer schädigenden Tendenz an Bedeutung verlieren, bleibt die Existenz von Korngrenzen für die meisten technisch relevanten Gefüge unabkömmlich, da sie maßgeblichen Einfluss auf die Festigkeit des Werkstoffs haben.

Dieser enorme Einfluss der Korngrenzen und deren Verteilung im Gefüge ist verbunden mit der Eigenschaft, dass die Korngrenze – vereinfachend gesagt – die Ausbreitung lokaler Kristallplastizität im Allgemeinen stark behindert. Auf diese Weise können Versetzungen vor Korngrenzen aufgestaut werden, ebenso zu beobachten ist das Abbremsen von Rissen als Folge eines Versetzungsaufstaus. Umgekehrt können aber gerade auch an Korngrenzen Risse entstehen, wenn es infolge von Aufstauungen zu lokalen Spannungskonzentrationen und damit einhergehender Schädigung kommt.

<sup>2</sup> „Fatigue crack nucleation at interfaces“ H. VEHOFF, A. NYKYFORCHYN, R. METZ, *Materials Science and Engineering A* 387-389 (2004) 546-551

Die im Detail sehr komplexen Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Korngrenzen sind Gegenstand zahlreicher Forschungsarbeiten, sowohl experimenteller, als auch theoretischer und simulatorischer Natur. Insbesondere die molekular-dynamischen Simulationen unternehmen den Versuch die bekannten Wechselwirkungsprozesse auf kleinster, also atomarer Ebene zu beschreiben. Die folgende Abbildung zeigt beispielsweise den Transmissionsprozess einer Versetzung (DA) in Aluminium, welche eine kohärente Zwillingskorngrenze passiert, die schräg von links unten nach rechts oben verläuft.

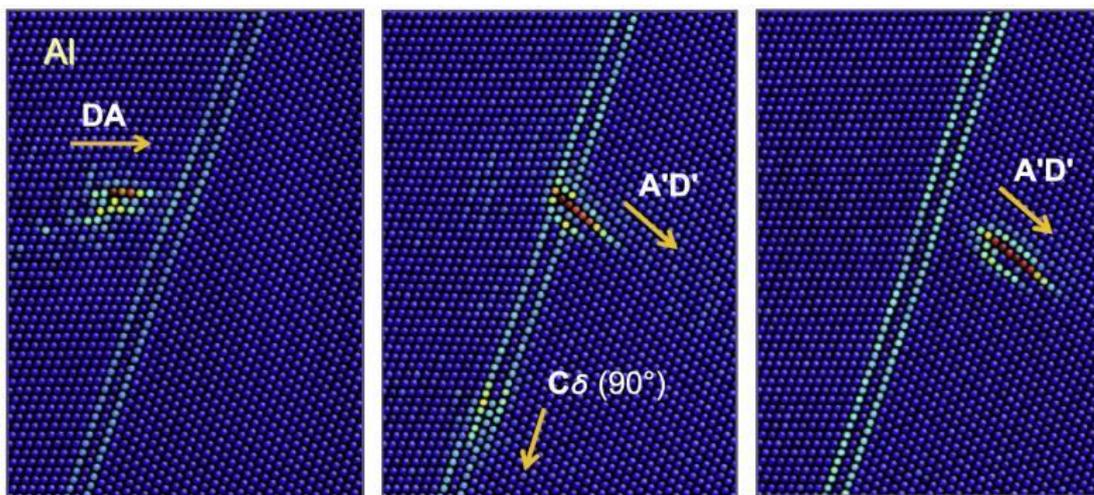


Abb. 1-5 MD Simulation einer Versetzungstransmission [Jin08]<sup>3</sup>

Beim Passieren der Korngrenze ändert die Versetzung entsprechend der anderen Kristallorientierung rechts der Korngrenze ihre Richtung ( $A'D'$ ) unter gleichzeitigem Einbau einer Differenzversetzung ( $C\delta$ ) in der Korngrenze, die dann entlang bzw. innerhalb der Korngrenze verläuft.

Die vorliegende Arbeit hingegen verfährt nach einem gänzlich anderen Ansatz, der aus ingenieurwissenschaftlicher Perspektive den Anspruch technisch besserer Realisierbarkeit und Praktikabilität in den Vordergrund stellt. Das heißt, dass Einflüsse, die uns nicht ohne weiteres zugänglich sind, wie z.B. die energetischen Verhältnisse der Korngrenze, deren atomare Struktur, sowie die lokalen Spannungsheterogenitäten, einfach ausgeblendet werden. Man kann es sich so vorstellen, dass die Korngrenze lokal als Blackbox betrachtet wird, wie die folgende Abbildung schematisch darstellen soll:

<sup>3</sup> „Interactions between non-screw lattice dislocations and coherent twin boundaries in face-centered cubic metals“ Z.H. JIN, P. GUMBSCH, K. ALBE, E. MA, K. LU, H. GLEITER, H. HAHN, *Acta Materialia* 56 (2008) 1126-1135

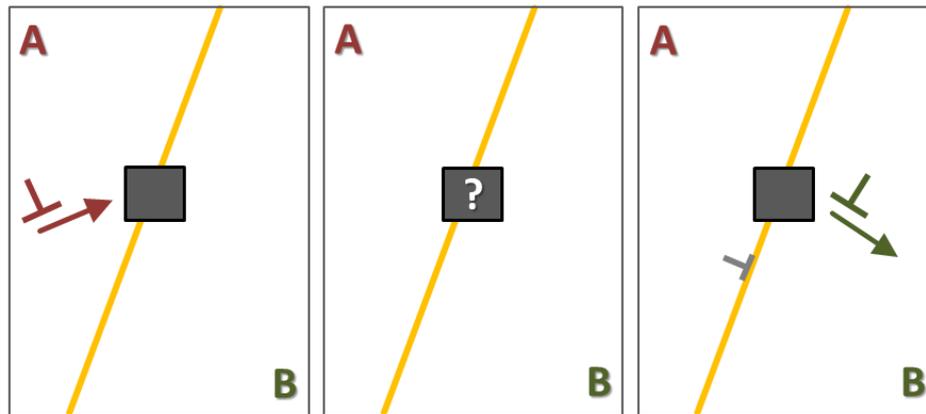


Abb. 1-6: Blackbox-Konzept für den Prozess der Versetzungstransmission

Der Vorteil dieser Betrachtungsweise liegt darin, dass sich die vorliegende Konfiguration einzig durch geometrische Informationen beschreiben lässt, die sich überdies auch noch in verhältnismäßig großer Entfernung vom eigentlichen Ort des Geschehens bestimmen lassen. Gemeint sind die Orientierungsdaten der benachbarten Körner, sowie die räumliche Lage der Korngrenze, die zwar im Allgemeinen nicht allorts genau bekannt ist, bei den jedoch später relevanten Zwillingkorngrenzen hingegen schon. Das ebenfalls für die Konfiguration relevante globale Spannungsfeld wird durch die Orientierung der Zugachse definiert. Auf diese Weise reduziert sich die gesamte Betrachtung auf die Lösung eines rein geometrischen Problems, das analytisch und effektiv rechenbar ist.

Um das in dieser Arbeit verfolgte Ziel, also die Bewertung einer Probe, genauer gesagt ihres Gefüges, hinsichtlich des Auftretens von Korn-zu-Korn-Nachbarschaften, die aufgrund ihrer Fehlorientierung, eingedenk der korngrenzenabhängigen geometrischen Passung der beteiligten Gleitsysteme nur einen geringen Barriere-Effekt aufweisen, wurde eine Berechnungsmethode (*STRONG – Slip Transfer Resistance Of Neighboring Grains*) entwickelt, welche alleine auf der Grundlage der an der Oberfläche mittels EBSD erfassbaren Orientierungsdaten, die somit rein „geometrische“ Widerstandswirkung einer einzelnen Korngrenze quantifizieren soll. Auf diese Weise soll jedem Nachbarschaftsverhältnis, also jeder Korngrenze, deren individueller Passungscharakter zuzuordnen sein, der dann in Betrachtung des Gesamtgefüges eine Identifikation (einschließlich Häufigkeit und Verteilung) jener Korngrenzen erlauben soll, die infolge ihrer Passung tendenziell für Gleittransfer-Mechanismen in Frage kommen, oder umgekehrt, infolge ihrer Fehlpassung eben nicht. Wie diese beiden gegenläufigen Effekte, insbesondere in ihren jeweils extremen Ausprägungen, Transmission und Blockade, in Zusammenhang mit möglichen Schädigungsmechanismen gebracht werden können, gilt es zu untersuchen. Die folgende Abbildung Abb. 1-7 soll schematisch zeigen, dass grundsätzlich beide Varianten bspw. zur Rissinitiierung (gelb) führen können.

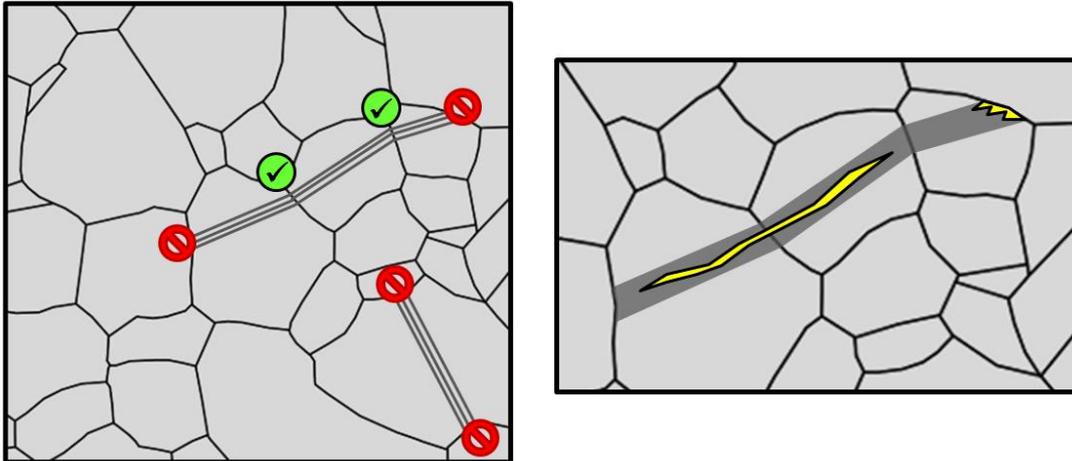


Abb. 1-7: Prinzip der *STRONG*-Methode zur Bewertung der einzelnen Korngrenzen hinsichtlich ihrer Neigung den Transport von Gleitung zu erlauben oder zu blockieren mit der damit verbundenen Entstehung von Schädigung (Aufreißen des Gleitbandes oder der Korngrenze)

Zum einen als Gleitbandriss, indem sich Gleitung über die Korngrenze hinweg ausbreitet (Transmissionsfall) und sich so im Vergleich zu Körnern, die einen Transfer nicht erlauben, verhältnismäßig viel Gleitung akkumuliert und schließlich die Dehnungslokalisierung innerhalb dieses Gleitbandes zur Schädigung führt. Oder zum anderen, indem die Gleitsystem-Fehlpassung an bzw. in der Korngrenze so stark ausfällt (Blockade-Fall), dass es infolge des Aufstaus von Versetzungen zu einem Aufreißen an der Korngrenze kommt.

Die erstgenannte Variante kann sozusagen als Ausbildung eines mesoskopischen Scherbandes interpretiert werden. Die betreffenden, jeweils abschnittsweise die Scherung (Gleitung) tragenden Einzelkörner bilden in diesem Sinne ein Cluster, innerhalb dessen sich die Verformung mehr oder minder gleichsinnig und ungehindert ausbreiten kann, so als ob der Cluster einem großen Einzelkorn entspräche. Das Vorliegen solcher „Cluster-Inseln“ im Gefüge führt deshalb lokal unweigerlich zu starken Abweichungen, bezüglich der anhand der globalen Korngrößen- und -orientierungsverteilung statistisch bestimmten Festigkeitseigenschaften des Gesamtgefüges. Um diesen abweichenden Einflüssen besser Rechnung tragen zu können, soll die Erfassung solcher Cluster im Mikro-Gefüge einen entscheidenden Beitrag leisten. Die Frage, wie sich ein diesbezüglich wiederum statistisches und ggf. reproduzierbares Auftreten im Sinne einer Textur widerspiegelt und in Korrelation zur Ausprägung von Schädigungsmechanismen steht, ist Gegenstand des Themas Grain Boundary Engineering (GBE).

## 2 Grundlagen und Stand der Forschung

In diesem zweiten Kapitel sollen einerseits die für das Verständnis dieser Arbeit notwendigen Grundlagen erörtert werden. Andererseits sollen, sowohl die Motivation, als auch die gedankliche Entwicklung der zugrundeliegenden Fragestellung in Bezug zur Forschungsliteratur ermöglicht werden. Um jedoch zunächst das Ziel der vorliegenden Arbeit im Vordergrund zu halten, sei der erste Blick dieses Kapitel auf eine allgemeine Einordnung des Themas gerichtet.

### 2.1 Grain Boundary Engineering (GBE)

Das sogenannte Grain Boundary Engineering (GBE) hat im Allgemeinen zum Ziel den Anteil von Korngrenzen mit „besonderen“ Eigenschaften im Vergleich zu den restlichen Korngrenzen zu erhöhen. Diese besonderen – im Sinne von besseren – Eigenschaften können zum Beispiel eine geringere Neigung zur Rissbildung, Porenbildung, Korrosion, Segregation usw. sein. Die Frage, wie die genannten Eigenschaften mit dem jeweiligen Korngrenzcharakter zusammenhängen, sowie die Frage, wie der Anteil jener Korngrenzen mittels GBE-Prozessen erhöht werden kann, übersteigt den Rahmen der hier möglichen und nötigen Ausführungen jedoch bei weitem. Hier, an dieser Stelle, soll im Vordergrund stehen, wie sich den jeweiligen Korngrenzen eine bestimmte Eigenschaft zuzuordnen und auch konkret im Gefüge lokalisieren lässt, um anhand der damit einhergehenden Verteilung des Auftretens der so identifizierten Korngrenzen, eine mögliche Ausprägung von Clustern, also zusammenhängenden Bereichen auszumachen, wie das folgende Beispiel verdeutlichen soll. Abb. 2-1 zeigt auf der linken Seite ein Korngrenzenetzwerk einer Nickelbasis-Superlegierung (Inconel 600), welches zunächst sämtliche vorhandenen Korngrenzen erfasst. Die nebenstehende Grafik blendet alle Kleinwinkel- und speziellen CSL- $\Sigma$ -Korngrenzen aus, sodass die (nicht-spezialen) Großwinkelkorngrenzen übrig bleiben. **Schuh et al.** haben diese Darstellung gewählt, um die Verteilung und Vernetzung der in diesem Fall ungewünschten – weil anfällig für intragranulare Korrosion – Großwinkelkorngrenzen sichtbar zu machen. Die so entstehenden Cluster können auf diese Weise, jeweils einzeln, durch deren, sozusagen „zusammenhängende Länge“ quantitativ erfasst werden [**Schu03**]<sup>4</sup>.

---

<sup>4</sup> „Analysis of grain boundary networks and their evolution during grain boundary engineering“ C.A. SCHUH, M. KUMAR, W.E. KING, *Acta Materialia* 51 (2003) 687-700

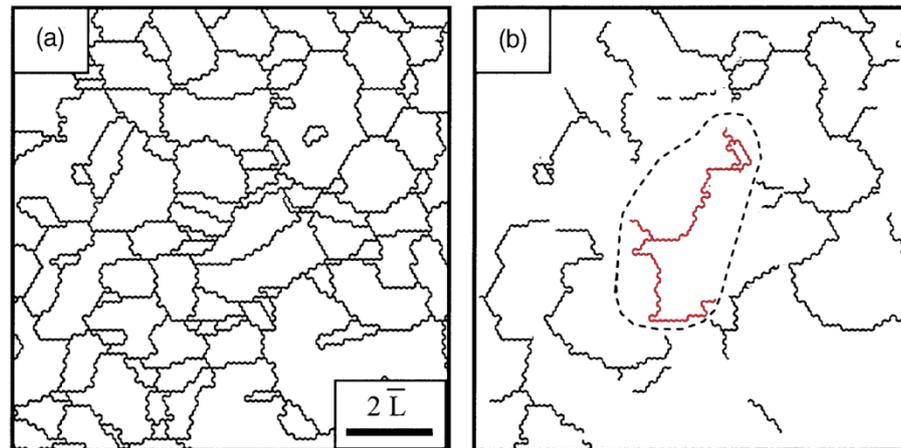


Abb. 2-1: a) Netzwerk sämtlicher Korngrenzen und b) Korngrenzencluster zusammenhängender (nicht-spezzieller) Großwinkelkorngrenzen [Schu03]

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass eine strenge Abgrenzung des bereits eingeführten Begriffs der Meso-Scherbänder von den sogenannten Makro-Scherbändern zu fassen ist. Letztere zeichnen sich dadurch aus, dass deren Entstehung eher auf einen auto-katalytischen Prozess zurückzuführen ist, indem sich ein initiales Mikro(scher)band lawinenartig über mehrere Körner hinweg unter Formierung eines Makro-Scherbandes ausbreitet [Korb86]<sup>5</sup>, wie in Abb. 2-2a gezeigt.

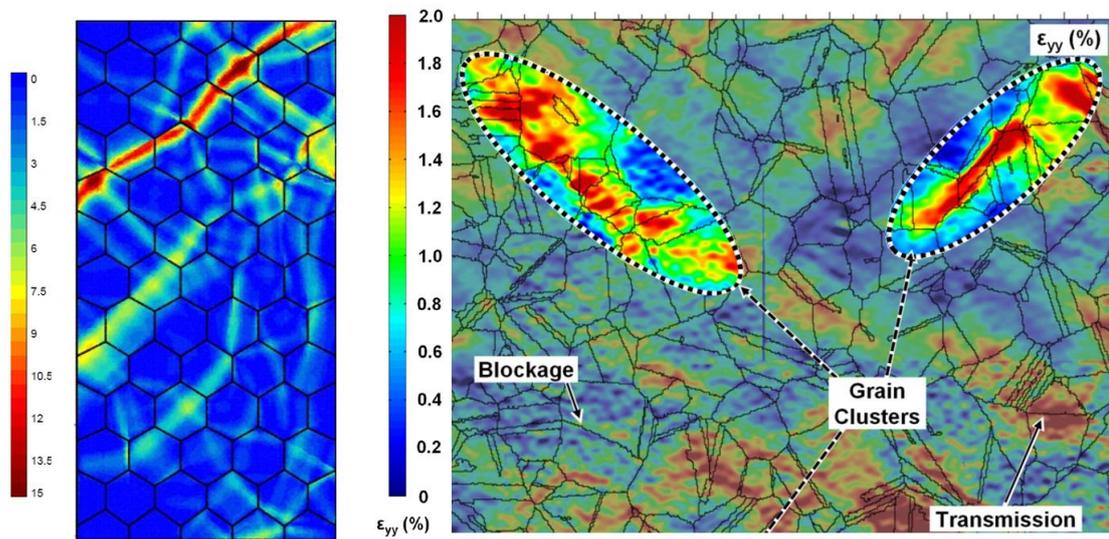


Abb. 2-2: a) Ausbildung von Makro-Scherbändern [Guil09]<sup>6</sup> und b) Korncluster innerhalb derer sich die plastische Deformation über mehrere Körner hinweg erstreckt [Abuz12a]<sup>7</sup>

<sup>5</sup> „Microscopic versus macroscopic aspect of shear bands deformation” A. KORBEL AND P. MARTIN, *Acta metallurgica*, Vol. 34, No. 10 (1986) 1905-1909

<sup>6</sup> „A study of the cluster effect on fatigue crack initiation” Y. GUILHELM, G. CAILLETAUD, S. BASSEVILLE, F. CURTIT, J.M. STÉPHAN, *International Conference of Fatigue Ottawa* (2009)

<sup>7</sup> „Quantitative understanding of the role of grain boundaries in polycrystalline deformation via multiscale digital image correlation“ PhD thesis, Wael Z M AbuZaid, *University of Illinois at Urbana-Champaign* (2012)

Abb. 2-2a stellt eine Simulation der (akkumulierten) visko-plastische Dehnung, wie sie sich innerhalb eines Korn(Waben)-Gefüges, bestehend aus statistisch verteilten „weichen“ und „harten“ Körnern, unter Formation von Makro-Scherbändern ausprägen kann. Hierbei spielen aufgrund des beschriebenen Entstehungsprozesses die jeweils einzelnen Korn-zu-Korn-Nachbarschafts(orientierungs)beziehungen jedoch nur eine nachrangige Rolle.

Der Begriff der Meso-Scherbänder soll hingegen das Vorliegen von Kornclustern umfassen, innerhalb denen sich die lokale plastische Verformung über mehrere benachbarte Körner tatsächlich aufgrund günstiger Lagebeziehungen gleichberechtigt erstreckt, wie es sich in Abb. 2-2b (besonders in den umrandeten Gebieten) darstellt. In diesen Kornclustern fällt die akkumulierte plastische Verformung dementsprechend höher aus, als in den Gefügebereichen, deren Nachbarschaftsbeziehungen eine solche Tendenz zur gemeinsamen Verformung eben nicht hergeben.

Da für diese im Zentrum der Betrachtung stehende Bedeutung der Nachbarschaftsbeziehung neben der grundsätzlichen Fehlorientierung der benachbarten Kristallkörner, vornehmlich auch die Grenzfläche und deren Lage an sich, also die Korngrenze, maßgeblich für die Frage etwaiger Gleitsystemkopplungen ist, sollen in den folgenden Abschnitten die für diese Arbeit so grundlegenden Eigenschaften von Korngrenzen beleuchtet werden.

## 2.2 Die Korngrenze

Im Zentrum dieser Arbeit steht die Betrachtung von Korngrenzen, sogenannten flächenhaften Kristallbaufehlern. Man kann sich diese Situation wie folgt denken: Treffen zwei unterschiedlich orientierte Einkristalle aufeinander, liegt es in der Natur der Sache, dass auf deren gemeinsamen Berührungsfläche die periodische Anordnung der jeweiligen Kristallgitterpunkte enden muss. Aus der Perspektive des einen Kristalls ist dessen Nachbar also falsch orientiert, genauso gilt dies natürlich auch anders herum. Deshalb ist die Rede von einem Kristallbaufehler.

Ebenso Gegenstand dieser Arbeit sind Ausbreitungsmechanismen von lokaler Kristallplastizität, kurz, die Bewegung von Versetzungen. Versetzungen sind keine flächenhaften Kristallbaufehler, sondern sie ziehen sich linienhaft durch einen Kristall. Ihre Bewegung verläuft durch das mit dem Kristall verbundene Peierls-Potential auf definierten kristallographischen Ebenen, den Gleitebenen, in ebenso wohldefinierte Gleitrichtungen. Folglich muss eine Störung des Kristalls, wie eben im Falle einer Korngrenze, unweigerlich dazu führen, dass die Versetzungsbewegung in irgendeiner Art und Weise beeinflusst wird.

Auf dieser Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Korngrenzen basieren letztlich die Fragestellungen, welche Thema dieser Arbeit sind. Unter welchen Voraussetzungen kann Gleitung über die Korngrenze hinweg erfolgen? Kann ein Riss bei gegebener Misorientierung die Korngrenze passieren oder wird er gestoppt?

Um diesen Fragen auf den Grund zu gehen, müssen zunächst einige werkstoffphysikalischen Grundlagen erläutert werden, insbesondere hinsichtlich ihrer quantitativen Erfassung, da die mathematische Modellierung, wie sie im Kapitel 4 dargelegt wird, eine gebotene Strenge bzgl. exakter Definition und Nomenklatur erfordert. Gemeint sind hiermit die vollständige Beschreibung von Kristallorientierungen, sowie der Gleitsystemcharakteristik im kubisch-flächenzentrierten Gitter.

Danach werden die Korngrenze und deren geometrische Beschreibung im Fokus stehen, insbesondere auch die Fälle spezieller Korngrenzen, wie u.a. der Zwillingskorngrenze. Neben der rein geometrischen Interpretation der Korngrenze, als Grenzfläche zweier benachbarter Kristallite, besteht überdies auch die Notwendigkeit, sowohl die energetischen Verhältnisse, also auch die spannungsmäßigen Inkompatibilitäten der Korngrenze in die Gesamtbetrachtung mit einzubeziehen – auch wenn diese beiden Komponenten, Spannungen und Energie, wie in der Einleitung angekündigt, gemäß dem Blackbox-Ansatz, nicht in die Berechnungen einfließen.

Dennoch bleiben alle drei Aspekte – Geometrie, Energie und Spannungen – stets eng miteinander verbunden. Denn die Inkompatibilitäten hängen ebenso wie die Korngrenzenenergie von den geometrischen Verhältnissen der beteiligten Orientierungen zueinander ab.

Aufgrund der enormen Komplexität, die sich bei der Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Korngrenzen zeigt, scheint es sinnvoll, die Wechselwirkungsmechanismen zunächst durch unterschiedliche Gewichtung der beteiligten Faktoren getrennt zu beschreiben. Das **LRB-Konzept** von **Lee, Robertson und Birnbaum** stellt die geometrischen Verhältnisse, insbesondere die Passung der Gleitsysteme auf der Korngrenze, in den Vordergrund. **Sangid et al.** hingegen haben die vom Korngrenzencharakter abhängige Grenzflächenenergie im Fokus, um den Vorgang der Gleittransmission als Bewegung durch eine energetische Barriere zu beschreiben. So oder so sind in beiden Fällen vor allem auch die lokalen Spannungsverhältnisse von entscheidender Bedeutung. Diese können jedoch gerade im Bereich der Korngrenze eine extrem komplizierte Gestalt annehmen. Denn das resultierende Gesamtspannungsfeld setzt sich neben der von außen angelegten Spannung zusätzlich zusammen aus den Inkompatibilitätsspannungen an der Korngrenze, sowie weiteren Spannungsfeldern von Versetzungsverteilungen, welche bei Gleitprozessen in aktiven Gleitsystemen entstehen. Die folgende Abbildung zeigt die drei wesentlichen Arten von Spannungsquellen, die in Superposition zur Gesamtspannung führen.

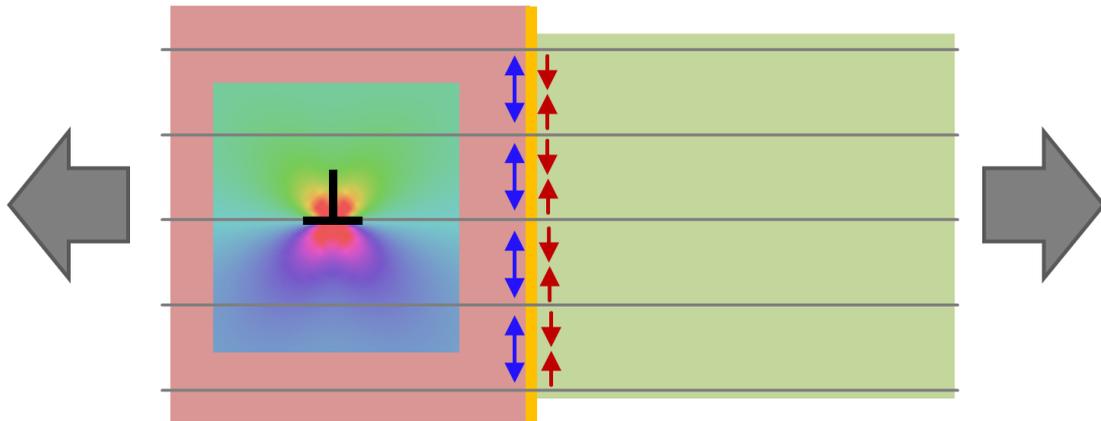


Abb. 2-3: Schematische Darstellung der Spannungsanteile bestehend aus (grau) globaler Spannung, (blau/rote Pfeile) elastische Zug-/Druck-Inkompatibilitätsspannungen an der Korngrenze, sowie die Spannungsverteilung einer Versetzungsanordnung

Da sowohl die Inkompatibilitätsspannungen, als auch die Spannungsfelder etwaiger Versetzungsverteilungen nicht ohne weiteres zugänglich sind, werden diese in der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Berechnungsmethode nicht berücksichtigt. Gleichwohl wird der Verzicht auf die Berücksichtigung der Inkompatibilitätsspannungen durch jeweils teil-quantitative Einzelfallabschätzungen legitimiert.

Nach der Beschreibung der theoretischen Grundlagen erfolgt eine Darstellung des Geometrie-Konzepts, dessen Entstehung und Weiterentwicklung, sowie alternative und kritische Betrachtungen.

Daran anschließend widmet sich der letzte Abschnitt dieses Kapitels der Beschreibung konkreter Gleit-Transferprozesse, wie sie in der aktuellen Forschungsliteratur zu finden sind, insbesondere in Hinblick auf die Entstehung von Rissen an Korngrenzen, aber auch bezüglich der Wirkung von Korngrenzen auf die Ausbreitung von Rissen.

Diese Gesamtschau bildet schließlich das Fundament für das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modell eines geometrischen Korngrenzenwiderstandes und der dazugehörigen *STRONG*-Methode.

Doch zunächst sei der Blick auf die Erläuterung der notwendigen Grundlagen gerichtet, wie sie in den folgenden Abschnitten dargelegt werden.

## 2.3 Die Kornorientierung

Ein einzelnes Korn bzw. ein einzelner Kristallit zeichnet sich durch seine jeweilige Kristallorientierung aus. Da die meisten Metalle in kubischer Symmetrie kristallisieren, kann man sich die Kornorientierung anschaulich als einen Würfel vorstellen, der seiner Orientierung entsprechend gedreht im jeweils betrachteten Korn liegt, wie folgende Abbildung zeigt.

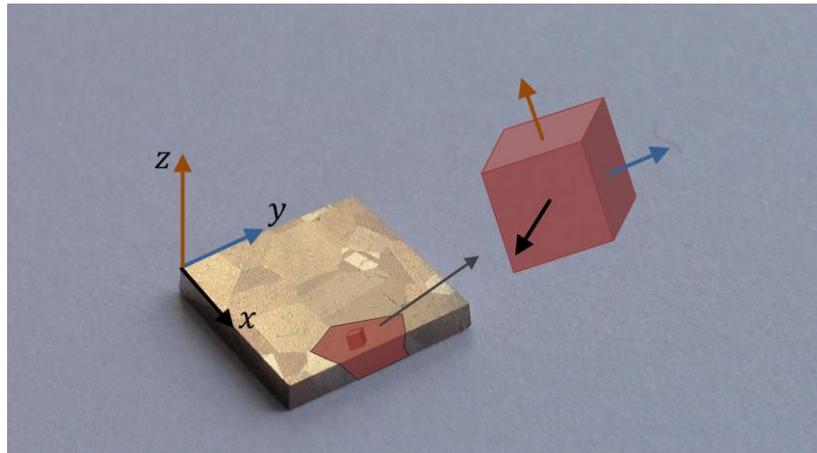


Abb. 2-4: Darstellung der Kristallorientierung als gedrehter Würfel

Um die Orientierung eines solchen im Raum gedrehten Würfels zu beschreiben ist eine Rotationsmatrix erforderlich, welche die Lage des Würfels bzgl. eines definierten Bezugssystems beschreibt. Das Bezugssystem sei die Probe bzw. das Laborsystem, in dem die Probe fest liegt. Jede beliebige Drehung im dreidimensionalen Bezugssystem lässt sich als konsekutive Abfolge von drei Einzeldrehungen darstellen. Die drei Eulerwinkel definieren jeweils eine dieser Einzeldrehungen, wie das folgende Schema zeigt<sup>8</sup>:

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Phi & \sin \Phi \\ 0 & -\sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\hspace{15em}}_{\mathbf{R}(\varphi_1) \cdot \mathbf{R}(\Phi) \cdot \mathbf{R}(\varphi_2)}$$

<sup>8</sup> „Introduction to Texture Analysis“ 2<sup>nd</sup> Edition, O. ENGLER AND V. RANDLE, CRC Press (2010) S. 34ff

Die Hintereinanderausführung der Einzelrotationen entspricht gerade dem Produkt aus den einzelnen Rotationsmatrizen und lässt sich somit zusammengefasst darstellen als Gesamt-Rotationsmatrix<sup>9</sup>  $\mathbf{R}'$ :

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R}(\varphi_1) \cdot \mathbf{R}(\Phi) \cdot \mathbf{R}(\varphi_2) \quad (1)$$

Multipliziert man die drei Matrizen vollständig aus, so ergibt sich als Gesamttrotation die folgende Darstellung:

$$\mathbf{R}' = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \Phi \sin \varphi_2 & -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \Phi \cos \varphi_2 & \sin \varphi_1 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \Phi \sin \varphi_2 & \cos \varphi_1 \cos \Phi \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 & -\cos \varphi_1 \sin \Phi \\ \sin \Phi \sin \varphi_2 & \sin \Phi \cos \varphi_2 & \cos \Phi \end{pmatrix}^T \quad (2)$$

Die Tatsache, dass das Matrixprodukt nicht kommutativ ist, bedeutet, dass es einen Unterschied macht, ob die Drehung vom Bezugssystem in das Kristallsystem erfolgt oder gerade umgekehrt(!). Im Rahmen dieser Arbeit ist diese strikte Unterscheidung streng erforderlich, da alle Betrachtungen in dem raum- und zugleich probenfesten Bezugssystem erfolgen. D.h. die drei Eulerwinkel sollen stets die Transformation von dem Kristallsystem in das Laborsystem beschreiben. Dies entspricht gerade der Umkehrung der Matrix  $\mathbf{R}'$ , also ihrer Transponierten:

$$\mathbf{R} = (\mathbf{R}')^T = \mathbf{R}(\varphi_2) \cdot \mathbf{R}(\Phi) \cdot \mathbf{R}(\varphi_1) \quad (3)$$

Die Kristallorientierung jedes Kornes ist somit durch dessen jeweilige Rotationsmatrix definiert, die in ihrer Abstraktheit jedoch recht unanschaulich ist. Ein besseres Gefühl, um eine gegebene Orientierung einzuschätzen erlaubt die sogenannte stereographische Projektion. Man denkt sich – im Falle der kubischen Symmetrie – den entsprechend seiner Orientierung gedrehten Würfel in dem Zentrum einer Kugel liegend. Weiter betrachtet man die drei Hauptachsen, also die Normalen auf den Würfelflächen, (100), (010), (001), welche die Kugeloberfläche in Verlängerung durchstoßen. Diese Durchstoßungspunkte lassen sich schließlich auf die Äquatorialebene projizieren, wie die Abbildungen Abb. 2-5 und Abb. 2-6 verdeutlichen sollen.

---

<sup>9</sup> Matrizen sind durchgängig durch fettgedruckte Symbole gekennzeichnet

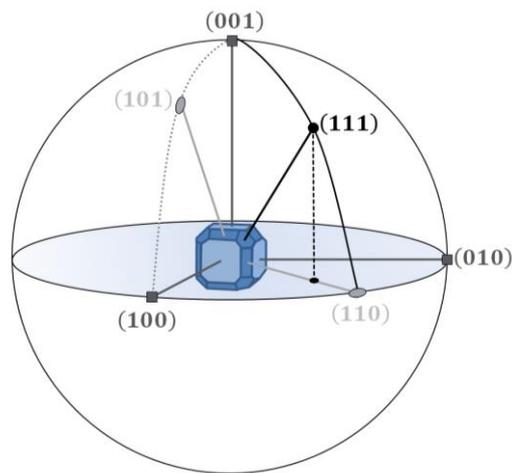


Abb. 2-5: Prinzip der stereographischen Projektion eines facettierten Kubus

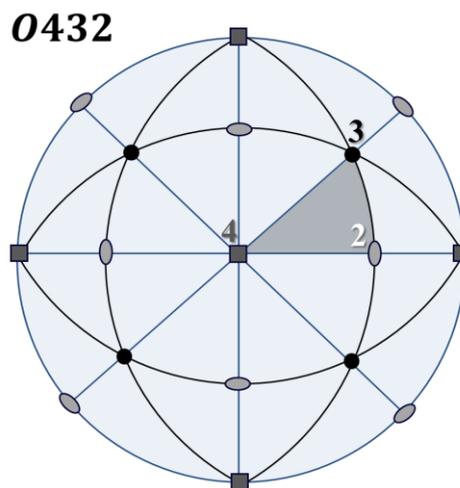


Abb. 2-6: Blick auf die Äquatorialebene nach der Projektion

Der in Abb. 2-5 dargestellte Kubus ist im Ursprungssystem orientiert und zeigt neben den Würfelhauptflächen  $\{100\}$  die ebenfalls in der kubischen Symmetrie wichtigen  $\{110\}$ , sowie  $\{111\}$  Facetten. Die Durchstoßpunkte sind entsprechend dieser Logik symbolisiert: Würfel, Linse, Punkt. Die nebenstehende Abb. 2-6 zeigt den Blick auf die Äquatorialebene, wobei die Kreisbögen den projizierten Großkreisen auf der Kugeloberfläche entsprechen. Man erkennt, dass die Äquatorialebene durch die sich schneidenden Kreisbögen in exakt 24 zusammenhängende Flächen unterteilt wird, die ihrerseits jeweils durch die drei unterschiedlichen Durchstoßungspunkte, Würfel, Linse, Punkt, abgesteckt sind. Dieses wiederkehrende Schema entspricht gerade der kubischen Symmetrie, wie sie durch die Oktaedergruppe<sup>10</sup> **0432** repräsentiert wird. Und gerade wegen dieser Symmetrie ist jede dieser Flächen, wie bspw. durch die Punkte **4-3-2** abgesteckt, gleichberechtigt in der Lage alle möglichen kubischen Kristallorientierung abzubilden. Man nennt diese Fläche deshalb auch Fundamentalbereich einer Symmetriegruppe.

Besser bekannt ist dieser Bereich auch unter der Bezeichnung „Standard Dreieck der Stereographischen Projektion“ bzw. SST (standard stereographic triangle), wie es in der nachfolgenden Abb. 2-7 dargestellt ist. Dieses Prinzip erlaubt es nun jede Orientierung bezüglich einer Blickrichtung als Farbe darzustellen, wie in nebenstehender Abb. 2-8 beispielhaft für vier Würfel gezeigt ist. Die Problematik, die bei dieser zweidimensionalen Reduktion einer eigentlich dreidimensionalen Orientierungsinformation besteht, wird bei Vergleich der beiden grünen Körner ersichtlich.

<sup>10</sup> Die Oktaedergruppe ist die Symmetriegruppe eines Oktaeders, also die Menge aller Abbildungen, die einen Oktaeder auf sich selbst abbildet. Die Symmetriegruppen für Oktaeder und Würfel sind isomorph, da duale Körper den gleichen Symmetrietyp besitzen.

„Elementare Geometrie und Algebra“ H.-W. HENN, Vieweg Verlag, 1. Auflage (2003) 83-84

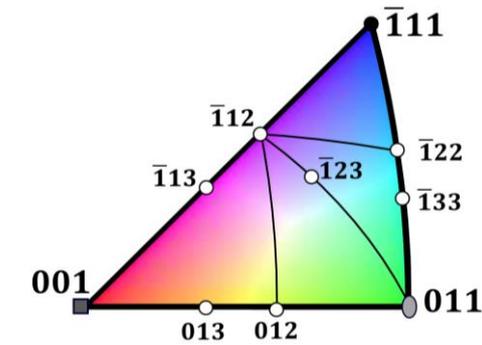


Abb. 2-7: Standard Dreieck (SST)

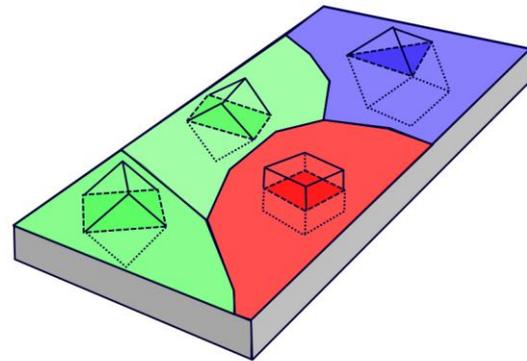


Abb. 2-8: Farbcodierung der Orientierung

In beiden Fällen zeigt die grüne Einfärbung an, dass die jeweiligen (110)-Flächen in Blickrichtung, also z-Richtung zeigen. Trotzdem ist zu erkennen, dass beide Würfel mitnichten exakt gleich orientiert sind. D.h. um die vollständige Orientierungsinformation zu erhalten muss die Orientierungsmatrix bzw. die Millersche Indizierung nach der  $(hkl)\langle uvw \rangle$ -Schreibweise herangezogen werden. Betrachten wir die zwei besagten grünen Körner, dann zeigt das folgende Schema zunächst wie Orientierungsmatrix und Miller-Indizierung zusammenhängen.

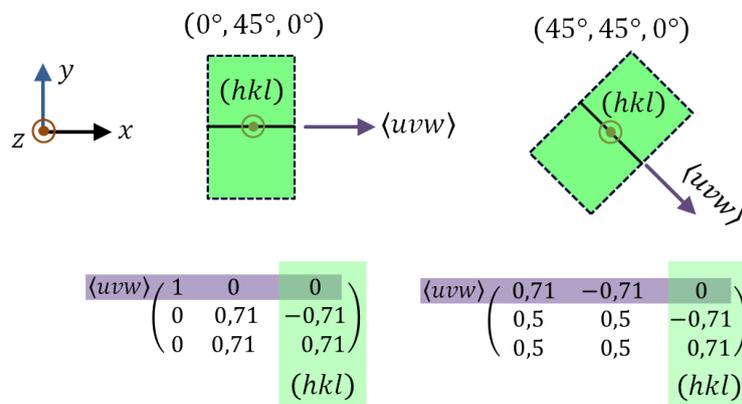


Abb. 2-9: Schema Orientierungsmatrix und Miller-Indizierung

Folglich lässt sich daraus unmittelbar ablesen, dass die  $(hkl)$ -Werte erwartungsgemäß gleich sind, da wir in beiden Fällen auf die  $(0\bar{1}1)$ -Ebene blicken. Der trotzdem vorhandene Orientierungsunterschied steckt jedoch in den  $\langle uvw \rangle$ -Werten, also der Richtung in welche die (100)-Fläche des Würfels zeigt.

Um diesen Unterschied in der Orientierung zweier Körner bzw. auch eines Kornes bezüglich einer Referenzorientierung (z.B. dem Bezugssystem) quantitativ zu beschreiben, spricht man von der sogenannten Missorientierung.

## 2.4 Die Missorientierung zweier Körner

Im Falle zweier benachbarter Körner, A und B, deren jeweilige Orientierung in ihren Orientierungsmatrizen  $R_A$  bzw.  $R_B$  Ausdruck findet, lässt sich gemäß dem folgend abgebildeten Schema eine weitere Matrix definieren, welche die Fehlorientierung zwischen beiden Körnern beschreibt. Es handelt sich hierbei wiederum um eine Rotationsmatrix, die gerade die Drehung beschreibt, die nötig ist, um den Kristall A auf den Kristall B abzubilden, oder umgekehrt – je nach Wahl der Perspektive.

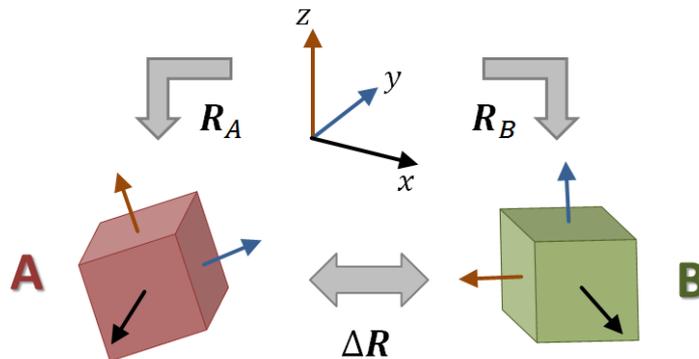


Abb. 2-10: Definition der Missorientierung  $\Delta R$  zwischen zwei Würfeln A und B

Die so definierte Missorientierungsmatrix  $\Delta R$  lautet

$$\Delta R = R_A^{-1} R_B = \begin{pmatrix} \Delta R_{11} & \Delta R_{12} & \Delta R_{13} \\ \Delta R_{21} & \Delta R_{22} & \Delta R_{23} \\ \Delta R_{31} & \Delta R_{32} & \Delta R_{33} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Jedoch ist diese Darstellung in der Regel ebenfalls wieder zu abstrakt, um daraus intuitiv einen Grad der Missorientierung ablesen zu können. Hierzu eignet sich die sogenannte Axis-Angle-Darstellung deutlich besser. Denn nach dem Eulerschen Theorem der Rotation, lässt sich jede beliebige Rotation im  $\mathbb{R}^3$  immer auch auf eine Einzelrotation um eine bestimmte definierte Achse  $\langle U, V, W \rangle$  reduzieren<sup>11</sup>.

Diese Achse definiert sich aus den Komponenten der Missorientierungsmatrix auf die folgende Weise:

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \frac{\begin{pmatrix} \Delta R_{23} - \Delta R_{32} \\ \Delta R_{31} - \Delta R_{13} \\ \Delta R_{12} - \Delta R_{21} \end{pmatrix}}{\sqrt{(\Delta R_{23} - \Delta R_{32})^2 + (\Delta R_{31} - \Delta R_{13})^2 + (\Delta R_{12} - \Delta R_{21})^2}} \quad (5)$$

<sup>11</sup> „Euler’s fixed point theorem: The axis of a rotation“ B. PALAIS AND R. PALAIS, *Journal of Fixed Point Theory and Applications* 2 (2007) 215-220

Der dazugehörige Drehwinkel  $\theta$  dieser Einzelrotation in der sogenannten Axis-Angle-Darstellung ist aufgrund der Kristallsymmetrie zunächst nicht eindeutig definiert. Um jedoch eine sinnvolle Größe für den Grad der Verdrehung zweier Kristallwürfel zu definieren, wählt man aus allen in Frage kommenden Drehwinkeln den kleinsten aus. Da jede Symmetrieoperation mit einem möglichen Wert für  $\theta$  einhergeht, müssen alle Symmetrien berücksichtigt werden. Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Materialien mit kubischer Symmetrie sind dies alle 24 Symmetrieoperationen der im vorherigen Abschnitt eingeführten Oktaedergruppe  $\mathbf{O}_{432}$ . Der gesuchte Winkel  $\theta$  ist dann der Minimumwert, der sich nach expliziter Ausführung der folgenden Gleichung ergibt.

$$\theta = \min \left| \arccos \left\{ \frac{\text{spur}(\mathbf{O}_{432}\Delta\mathbf{R}) - 1}{2} \right\} \right| \quad (6)$$

Die Operation  $\text{spur}(\mathbf{O}_{432}\Delta\mathbf{R})$  ergibt die Summe der Spurelemente der Matrix, die sich bei der Multiplikation von jeweils einer Symmetrieoperation der Gruppe  $\mathbf{O}_{432}$  und der Missorientierungsmatrix  $\Delta\mathbf{R}$  ergibt.

Die 24 möglichen Drehoperationen setzen sich im Detail wie folgt zusammen:

- Die Drehungen um die **drei Hauptachsen** des Würfels um je  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  oder  $270^\circ$  ergeben zusammen 9 Drehungen mit der Ordnung 4. (4)
- Die Drehungen um die **vier Hauptdiagonalen** um je  $120^\circ$  oder  $240^\circ$  ergeben zusammen 8 Drehungen mit der Ordnung 3. (3)
- Die Drehungen um die **sechs Achsen gegenüberliegender Kantenmittelpunkte** um  $180^\circ$  ergeben 6 Drehungen mit der Ordnung 2. (2)

In Summe sind dies – die **Identität** eingeschlossen – 24 mögliche Drehungen. Die Ordnungsgrade der jeweiligen Drehoperationen, (4), (3) und (2) geben die sogenannte Zähligkeit der jeweiligen Symmetrieachsen an. So sind die Hauptachsen beispielsweise vierzählig, da vier symmetrienerhaltende Drehungen à  $90^\circ$  möglich sind bis der Ursprungszustand wieder erreicht ist. Diese Zähligkeit erklärt somit auch die Nomenklatur der Bezeichnung  $\mathbf{O}_{432}$ , wobei das „O“ für Oktaeder steht. Sowohl geometrisch anschaulich, als auch mathematisch explizit, stellt sich die Oktaedergruppe wie folgt dar:

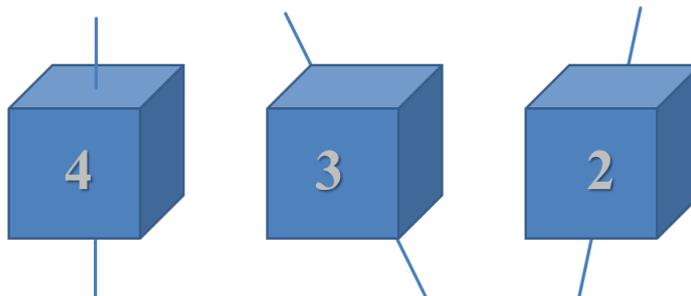


Abb. 2-11: Schematische Darstellung der möglichen Drehoperationen der Würfelsymmetrie

(4)	$\langle 100 \rangle$	$\langle 010 \rangle$	$\langle 001 \rangle$			
$90^\circ$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$			
$180^\circ$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$			
$270^\circ$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$			
(3)	$\langle 111 \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$		
$120^\circ$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		
$240^\circ$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix}$		
(2)	$\langle 011 \rangle$	$\langle 101 \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\langle \bar{1}01 \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\langle 0\bar{1}\bar{1} \rangle$
$180^\circ$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$

Tabelle 2-1: Die 23 nichttrivialen Drehoperationen der Oktaedergruppe in Matrizenform

Der so berechnete Missorientierungswinkel  $\theta$  erlaubt schließlich eine direkte und anschauliche Aussage, wie stark „verdreht“ zwei Körner zueinander sind bzw. wie verdreht eine Orientierung bzgl. einer Referenz ist. Wie dieser Winkel  $\theta$  zu interpretieren ist, soll das folgende Beispiel veranschaulichen. Betrachtet werden zwei Würfel (rot und grün) mit den Eulerwinkeln  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  bzw.  $(207^\circ, 49^\circ, 117^\circ)$ , d.h. der rote Würfel liegt im Bezugssystem, der grüne ist verdreht, wie Abb. 2-12 zeigt.

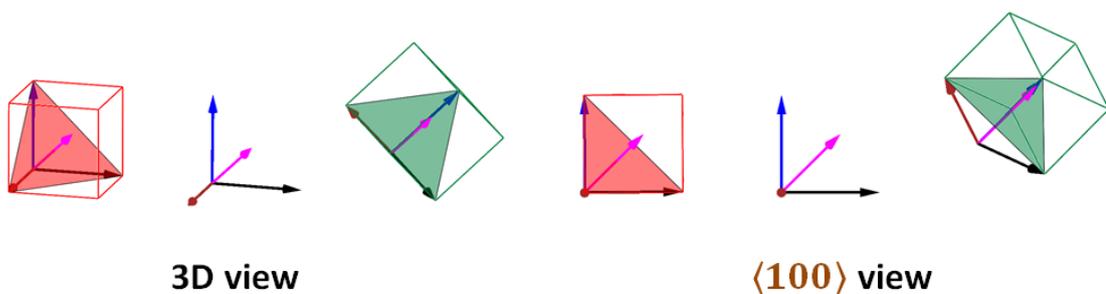


Abb. 2-12: Beispiel einer speziellen Missorientierungsbeziehung aus zwei Blickrichtungen

Abb. 2-12 gewährt den Blick aus zwei verschiedenen Perspektiven, wobei die Dreiecke gerade die jeweiligen  $(111)$ -Ebenen darstellen und der pinkfarbene Vektor die Ebenennormalen in  $\langle 111 \rangle$ -Richtung. Betrachtet man die im Beispiel gewählte Konstellation in der Axis-Angle-Darstellung ergeben sich die folgenden für diesen Fall charakteristischen Werte:

$$\Delta \mathbf{R} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \theta_{\min} = \arccos\left(\frac{2-1}{2}\right) = 60^\circ \quad (8;9)$$

D.h. die Missorientierungsachse entspricht gerade der  $\langle 111 \rangle$ -Ebenennormalen und der dazugehörige Drehwinkel beträgt exakt  $60^\circ$ , was wiederum gerade dem Winkel im gleichseitigen Dreieck entspricht. Dreht man die Blickrichtung in genau diese Richtung, fällt die besondere Symmetrie dieser Anordnung direkt ins Auge.

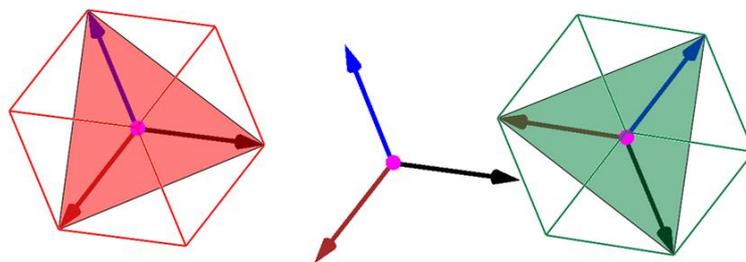


Abb. 2-13: Blick in  $\langle 111 \rangle$ -Richtung, Axis-Angle-Perspektive

Diese charakteristische Missorientierung und die damit einhergehende Symmetrie zeichnet sich dadurch aus, dass die  $(111)$ -Ebenen beider Würfelorientierungen identisch sind, obwohl die Würfel an sich nicht identisch sind. Sie liegen in dieser Konstellation jedoch genau spiegelbildlich zu ihrer gemeinsamen Ebene, die deshalb auch Zwillingssebene genannt wird. Betrachtet man die statistische Orientierungsverteilung von Gefügen von Materialien (wie z.B. Kupfer), die zu solchen Zwillingsbeziehungen neigen, kommen Missorientierungen von  $60^\circ$  besonders häufig vor (vgl. Abb. 2-14). Liegt eine solche Bevorzugung nicht vor, sondern eine tatsächlich regellose Verteilung der Kristallorientierungen so zeigt Abb. 2-15 die dafür typische Häufigkeitsverteilung in Form des charakteristischen Verlaufs eines Mackenzie-Plots.

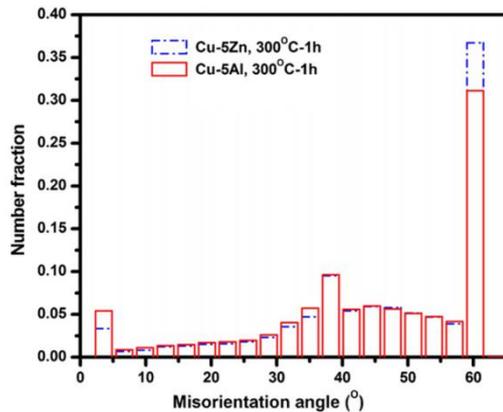


Abb. 2-14: Missorientierungsverteilung ultrafeinkörniger Cu-Al und Cu-Zn Legierungen [Sarm08]<sup>12</sup>

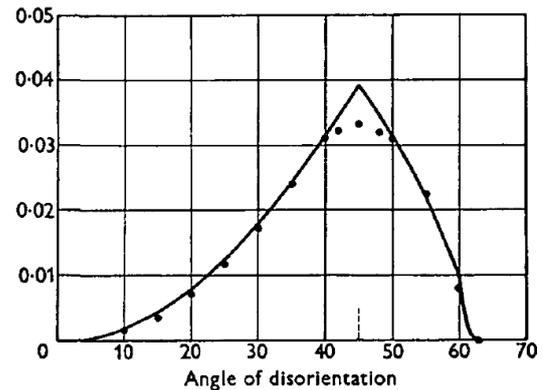


Abb. 2-15: Mackenzie-Plot statistisch verteilter Kristallorientierungen in kubischer Symmetrie [Mack58]<sup>13</sup>

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Axis-Angle-Darstellung sich zum einen sehr gut dazu eignet abstrakte Orientierungsbeziehungen prägnant mit der Angabe nur eines Winkels zu erfassen, was später eine einfache Klassifizierung von Kleinwinkel- und Großwinkelkorngrenzen ermöglicht. Zum anderen ermöglicht die zusätzliche Betrachtung der zugehörigen Missorientierungsachsen die Identifizierung möglicher vorhandener Symmetriebeziehungen, wie sie beispielsweise bei Zwillingkorngrenzen vorliegen. Die  $60^\circ$ - $\langle 111 \rangle$ -Zwillingbeziehung ist zwar die im Allgemeinen häufigste Symmetriebeziehung, mitnichten jedoch die einzige. Deshalb befasst sich der folgende Abschnitt mit weiteren möglichen charakteristischen Axis-Angle-Paaren, die mit einer gemeinsamen Symmetrieebene einhergehen, welche auch in der Bezeichnung CSL (coincident site lattice) Ausdruck finden.

### 2.4.1 CSL- $\Sigma$ -Beziehungen

CSL- $\Sigma$ -Beziehungen zeichnen sich durch spezielle Paare von  $\theta$  Drehwinkeln und  $\langle U, V, W \rangle$ -Richtungen aus. In diesen Fällen sind beide Kristallgitter so zueinander gedreht, dass Gitterpunkte aus beiden Gittern teilweise zusammenfallen, also koinzident liegen. Diese Koinzidenzpunkte bilden aufgrund ihrer periodischen Anordnung wiederum ein eigenes Gitter, das CSL-Gitter, wie in Abb. 2-16 dargestellt.

<sup>12</sup> „Microstructure and mechanical properties of ultra fine grained Cu-Zn and Cu-Al alloys produced by cryorolling and annealing“ V.S. SARMA, K. SIVAPRASAD, D. STURM, M. HEILMAIER, *Materials Science and Engineering A* 489 (2008) 253-258

<sup>13</sup> „Second paper on statistics associated with the random disorientation of cubes“ J.K. MACKENZIE, *Biometrika* 45 (1958) 229-240

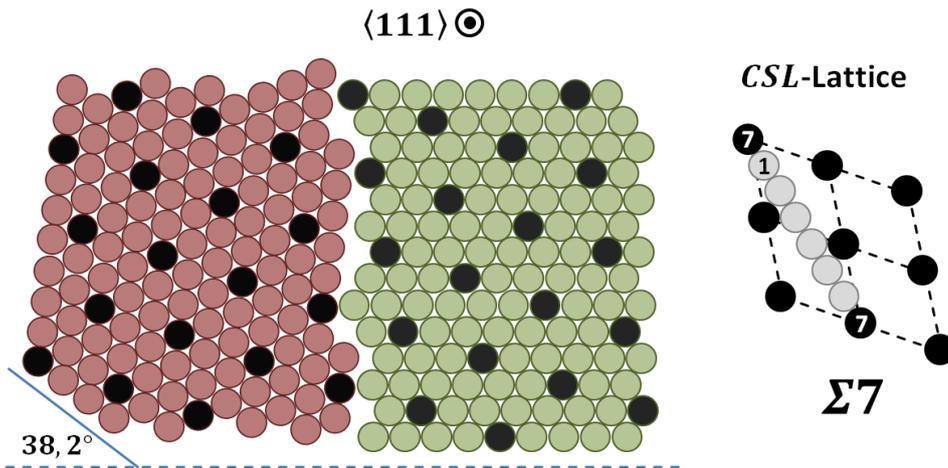


Abb. 2-16: CSL- $\Sigma 7$  Missorientierung mit  $38,2^\circ$  Drehung um die Achse  $\langle 111 \rangle$

Das in Abb. 2-16 gezeigte Beispiel demonstriert, wie bei einer Drehung um  $38,2^\circ$  der im kfz-Gitter dichtest gepackten (111)-Ebene ein Übergitter erzeugt wird, das Punkte beider Kristalle enthält. Die  $\Sigma$ -Klassifizierung gibt an, jeder wievielte Kristallgitterpunkt zum Übergitter, dem CSL-Gitter gehört. In diesem Fall jedes siebte.

Das kleinste CSL-Gitter und damit auch der kleinste  $\Sigma$ -Wert werden durch die bereits erläuterte Zwillingsbeziehung erzeugt.

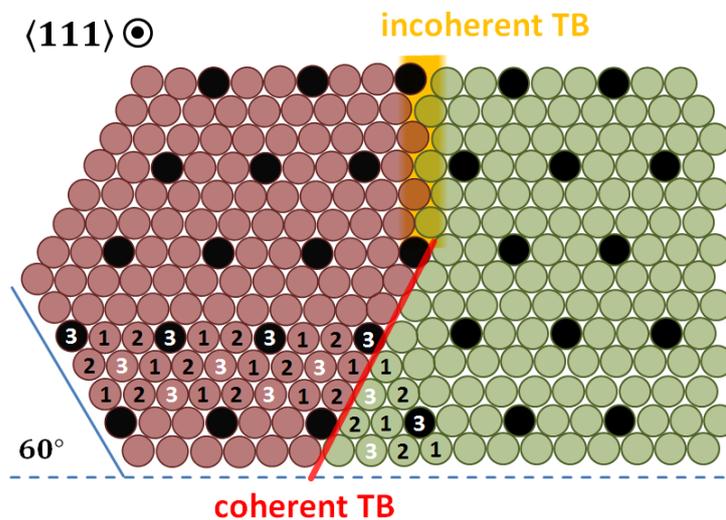


Abb. 2-17: CSL- $\Sigma 3$  Zwillingsorientierung

Von großer Bedeutung ist hierbei die Lage der Korngrenze bezüglich des CSL-Gitters. Denn die Korngrenze ist nur dann tatsächlich eine sogenannte Zwillingskorngrenze, wenn sie, wie im unteren Teil der Abb. 2-17 mit der roten Linie dargestellt, kohärent zu dem CSL-Übergitter ist. Dann fällt die Korngrenzenebene exakt mit einer (111)-Ebene

zusammen, was großen Einfluss auf den energetischen Charakter der Korngrenze hat. Verläuft die Korngrenze jedoch – unabhängig von der trotzdem vorhandenen Zwillingsbeziehung der benachbarten Körner – nicht entlang des CSL-Gitters, so spricht man von einer inkohärenten Korngrenze. Der Begriff Zwillingskorngrenze ist in diesem Fall folglich nicht korrekt. In der Literatur wird dieser feine Unterscheid stellenweise nicht immer exakt gemacht.

In der folgenden Tabelle findet sich eine Auflistung der ersten 32  $\Sigma$ -Beziehungen inklusive deren Axis-Angle-Parameter. Die drei Auflistungen unterscheiden sich lediglich in der Sortierung. Die mittlere Liste ordnet die  $\Sigma$ -Werte mit aufsteigender Missorientierung. Die Anordnung der rechten Liste erfolgt mit steigender Indizierung der Drehachse. Die Daten finden sich tabelliert in den Arbeiten von Hans Grimmer [**Grim84**]<sup>14</sup>.

$\Sigma$	$\theta$	$\langle UVW \rangle$	$\Sigma$	$\theta$	$\langle UVW \rangle$	$\Sigma$	$\theta$	$\langle UVW \rangle$
3	60,00	111	25a	16,26	100	25a	16,26	100
5	36,86	100	31a	17,90	111	37a	18,92	100
7	38,21	111	37a	18,92	100	13a	22,62	100
9	38,94	110	33a	20,10	110	17a	28,07	100
11	50,47	110	21a	21,78	111	5	36,86	100
13a	22,62	100	13a	22,62	100	29a	43,60	100
13b	27,79	111	19a	26,53	110	33a	20,10	110
15	48,19	210	13b	27,79	111	19a	26,53	110
17a	28,07	100	17a	28,07	100	27a	31,59	110
17b	61,90	221	27a	31,59	110	9	38,94	110
19a	26,53	110	39a	32,20	111	11	50,47	110
19b	46,80	111	33b	33,60	311	33c	59,00	110
21a	21,78	111	35a	34,00	211	31a	17,90	111
21b	44,41	211	27b	35,43	210	21a	21,78	111
23	40,45	311	5	36,86	100	13b	27,79	111
25a	16,26	100	7	38,21	111	39a	32,20	111
25b	51,68	331	9	38,94	110	7	38,21	111
27a	31,59	110	23	40,45	311	19b	46,80	111
27b	35,43	210	37b	43,14	310	3	60,00	111
29a	43,60	100	35b	43,20	331	27b	35,43	210
29b	46,40	221	29a	43,60	100	15	48,19	210
31a	17,90	111	21b	44,41	211	35a	34,00	211
31b	52,20	211	29b	46,40	221	21b	44,41	211
33a	20,10	110	19b	46,80	111	31b	52,20	211
33b	33,60	311	15	48,19	210	29b	46,40	221
33c	59,00	110	39b	50,13	321	17b	61,90	221
35a	34,00	211	11	50,47	110	37b	43,14	310
35b	43,20	331	25b	51,68	331	33b	33,60	311
37a	18,92	100	31b	52,20	211	23	40,45	311
37b	43,14	310	33c	59,00	110	39b	50,13	321
39a	32,20	111	3	60,00	111	35b	43,20	331
39b	50,13	321	17b	61,90	221	25b	51,68	331

Tabelle 2-2: CSL-Beziehungen sortiert nach  $\Sigma$ ,  $\theta$  und  $\langle UVW \rangle$

<sup>14</sup> „The Generating Function for Coincidence Site Lattices in the Cubic System”, HANS GRIMMER, *Acta Cryst. A40* (1984) 108-112

## 2.5 Die Gleitsystemcharakteristik

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

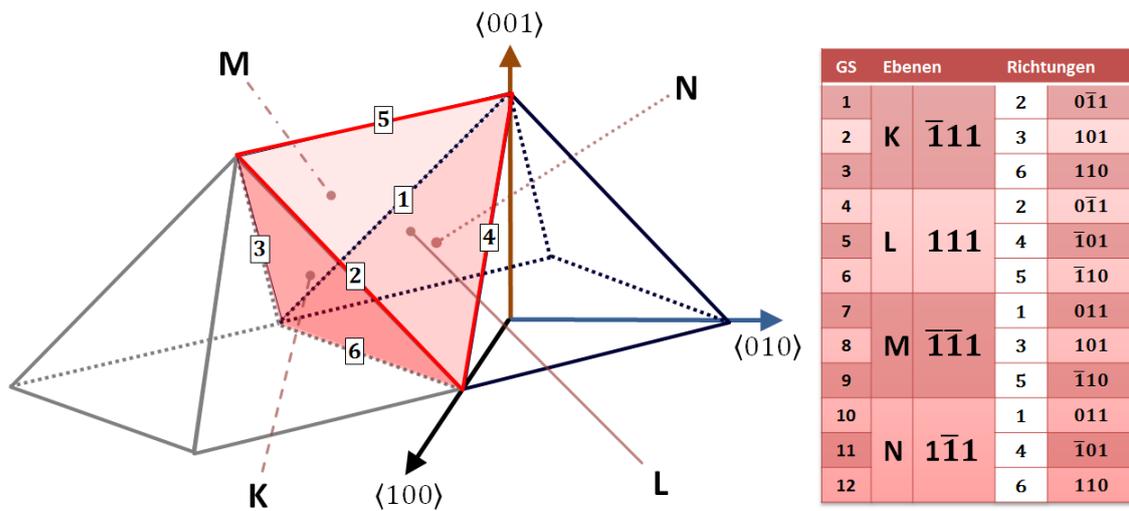


Abb. 2-18: Darstellung der Gleitsystemcharakteristik

Tabelle 2-3: Nomenklatur

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

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

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

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

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

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

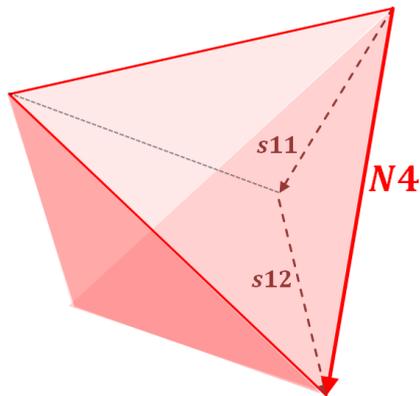


Abb. 2-19: Thompson Tetraeder mit der Versetzungsreaktion gemäß Gl.(10)

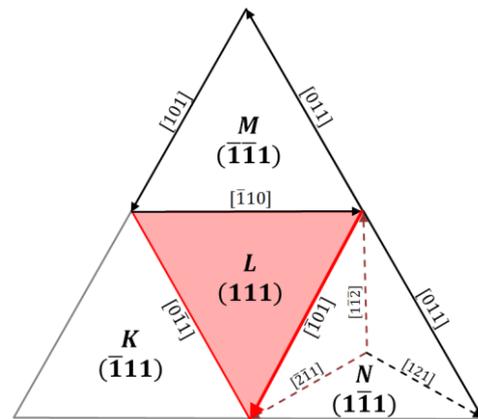


Abb. 2-20: Aufgefalteter Thompson Tetraeder

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

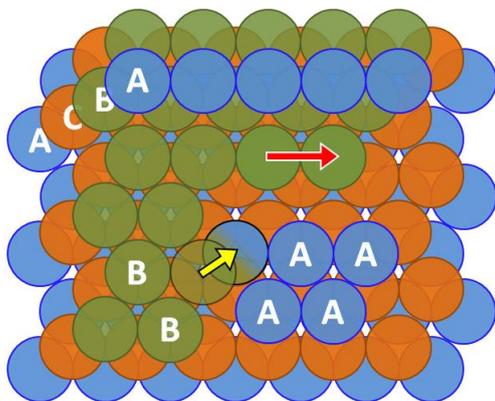


Abb. 2-21: Blick auf die (111)-Ebenen im kfz-Gitter (roter Pfeil: vollständige Versetzung, gelber Pfeil: Shockley Partialversetzung)

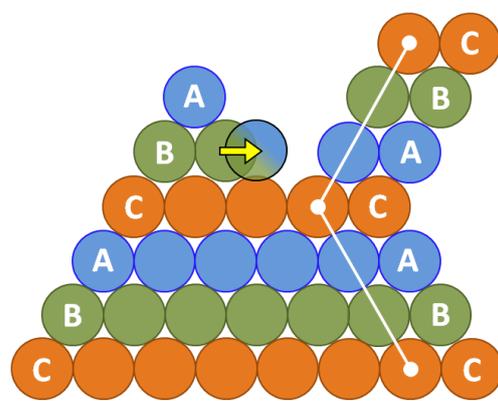


Abb. 2-22: Blick entlang der (111)-Ebenen (links: ungestörte Stapelfolge, rechts: gestörte Stapelfolge infolge eines Stapelfehlers)

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

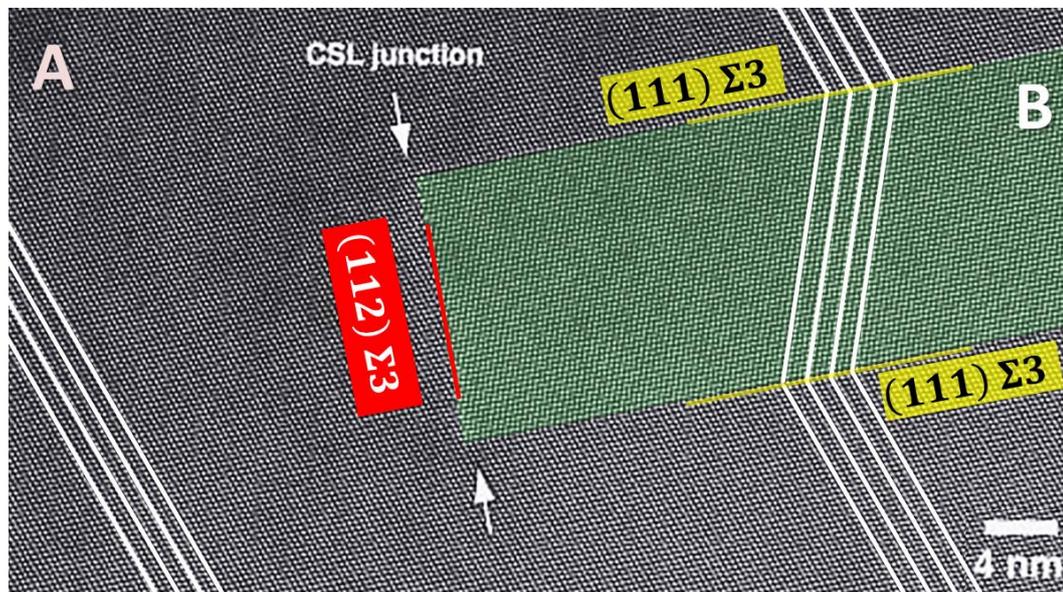


Abb. 2-23: HRTEM-Aufnahme einer (112) und (111)  $\Sigma 3$  Korngrenze in polykristallinem Si [Saka07]<sup>16</sup>

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

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

## 2.6 Die Korngrenzenorientierung

Eine prägnante Formulierung, welche den geometrischen Orientierungscharakter einer Korngrenze vollständig beschreibt, liefert die folgende Definition: „Die Korngrenze ist der am längsten bekannte, aber auch am wenigsten verstandene Gitterfehler. Eine Korngrenze trennt Bereiche gleicher Kristallstruktur aber unterschiedlicher Orientierung. Sie ist bei entsprechender Ätzung bereits mit dem bloßen Auge auf der Oberfläche eines grobkörnigen Werkstoffes auszumachen.“

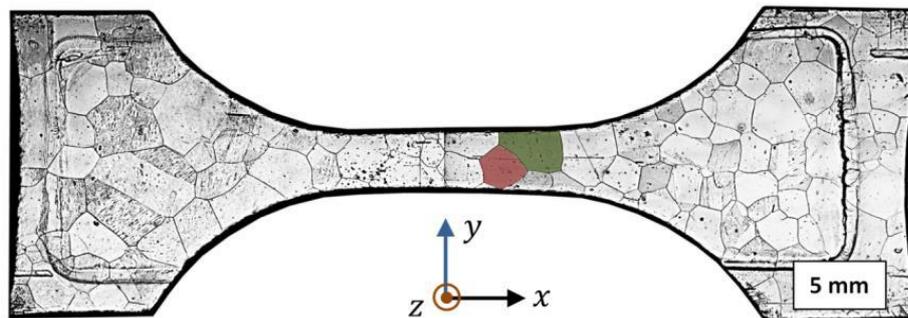


Abb. 2-24: Grobkörniges Gefüge einer Flachzugprobe (P2) aus reinem Nickel.

Der Mangel an physikalischem Verständnis von Korngrenzen ist ihrer komplexen Struktur zuzuschreiben, die bereits eine aufwendige mathematische Beschreibung zur makroskopischen Festlegung erfordert.

Im dreidimensionalen Fall benötigt man **acht** Parameter zur Festlegung der Korngrenze, **drei** für die Orientierungsbeziehung (der benachbarten Kristallite), **zwei** weitere für die räumliche Lage der Korngrenze (zur Definition einer Korngrenzenormalen) und schließlich die **drei** Komponenten des Translationsvektors. Die Eigenschaften, insbesondere die Energie einer Korngrenze, sind also prinzipiell eine Funktion von acht Variablen. Dabei können wir fünf beeinflussen (im Sinne von tatsächlicher Variabilität), nämlich Orientierungsbeziehung und Korngrenzenlage. Der Translationsvektor (die drei verbleibenden Parameter) wird vom Kristall so gewählt, daß die Korngrenzenenergie minimal ist.“ [Gott07]<sup>17</sup>

Da sich die Betrachtungen im Rahmen dieser Arbeit ohnehin auf den rein geometrischen Charakter der Korngrenze beschränken, sind es schließlich die fünf erstgenannten Parameter (Orientierungsbeziehung und Korngrenzenlage), welche die Korngrenze vollständig beschreiben.

Die Korngrenzenlage kann (mit der Annahme einer näherungsweise ebenen Korngrenzenfläche) durch Angabe einer Korngrenzenormalen beschrieben werden:

<sup>17</sup> „Physikalische Grundlagen der Materialkunde“ 3. Auflage, G. GOTTSTEIN (2007) S. 83ff

$$\vec{n} = \vec{n}(\delta, \varepsilon) \quad (11)$$

Diese wiederum lässt sich durch die Angabe zweier Winkel eindeutig definieren: Einem sogenannten **Dreh- bzw. Twistwinkel**  $\delta$ , der den oberflächlichen Verlauf der Korngrenze erfasst und einem **Kipp- bzw. Tiltwinkel**  $\varepsilon$ , welcher den Tiefenverlauf der Ebene beschreibt, wie folgende Abbildung verdeutlichen soll.

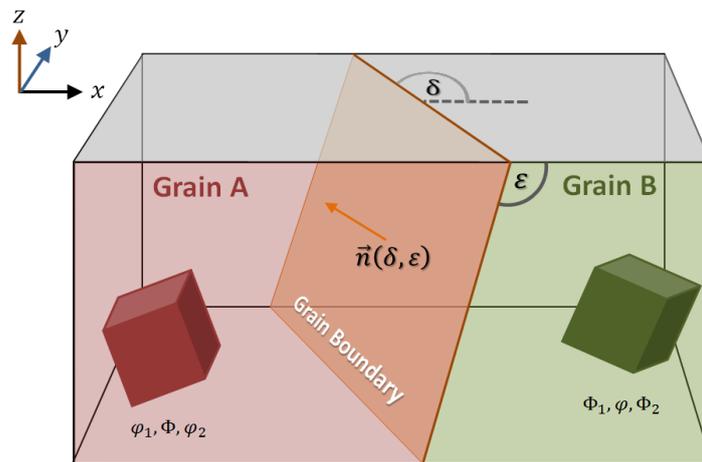


Abb. 2-25: Schematische Darstellung der geometrischen Gegebenheiten zweier benachbarter Kristallorientierungen A und B, die durch die Korngrenze voneinander getrennt sind.

Die Orientierungsbeziehung zwischen zwei benachbarten Kristalliten, auch Missorientierung genannt, kann wie zuvor beschrieben durch drei Eulerwinkel ausgedrückt werden, welche z.B. die Drehung von Korn B aus Perspektive von Korn A beschreiben. Alternativ hierzu – und im Rahmen dieser Arbeit bevorzugt – wird die Missorientierung durch die sogenannte **Missorientierungsmatrix**  $\Delta R$  ausgedrückt. Diese wiederum hängt von den jeweiligen Eulerwinkeln der beiden benachbarten Körner ab. Diese lauten  $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$  für Korn A bzw.  $\phi_1, \phi, \phi_2$  für Korn B. Beide Eulerwinkeltripel beschreiben die jeweilige Kristallorientierung bezüglich des raum- und probenfesten Koordinatensystems  $(x, y, z)$  [Engl10]<sup>18</sup>.

Diese Darstellungsart erhöht zwar die Anzahl der das System beschreibenden Parameter wiederum auf **acht** ( $\varphi_1, \Phi, \varphi_2, \phi_1, \phi, \phi_2, \delta, \varepsilon$ ), was sich jedoch als praktischer erweist, da auf diese Weise alle Orientierungsinformation direkt und eindeutig zugänglich sind.

Diese acht Parameter bilden die Grundlage für die gesamten mathematischen Betrachtungen im Rahmen dieser Arbeit. Deren Zusammenhang mit den grundlegenden Wechselwirkungseffekte der Korngrenze, sowie den damit verbundenen Fragestellungen in der aktuellen Forschung, werden im den folgenden Abschnitten behandelt.

<sup>18</sup> „Introduction to Texture Analysis“ 2<sup>nd</sup> Edition, O. ENGLER AND V. RANDLE, CRC Press (2010)

## 2.7 Der Einfluss der Korngrenze

Um den enormen Einfluss der Korngrenze auf die mechanischen Eigenschaften eines Gefüges exemplarisch zu erläutern, wird in nahezu allen wissenschaftlichen Abhandlungen der Hall<sup>19</sup>-Petch<sup>20</sup>-Effekt aufgeführt. Kurz in Worte gefasst: Eine Verringerung der Korngröße hat eine Erhöhung der Fließgrenze eines Materials zur Folge. Die Erklärung hierfür liegt in der Wechselwirkung der für die plastische Verformung, also das Fließen, notwendigen Versetzungen mit der Korngrenze. Je kleiner die Körner, umso eher stauen sich Versetzungen an den Korngrenzen an, welche die Versetzungsbewegung im Allgemeinen blockieren. Die so entstehenden Versetzungs-Pile-Ups (vgl. Abb. 2-26) und die damit einhergehenden Spannungen führen letztlich zu der beobachteten effektiven Fließspannungserhöhung.

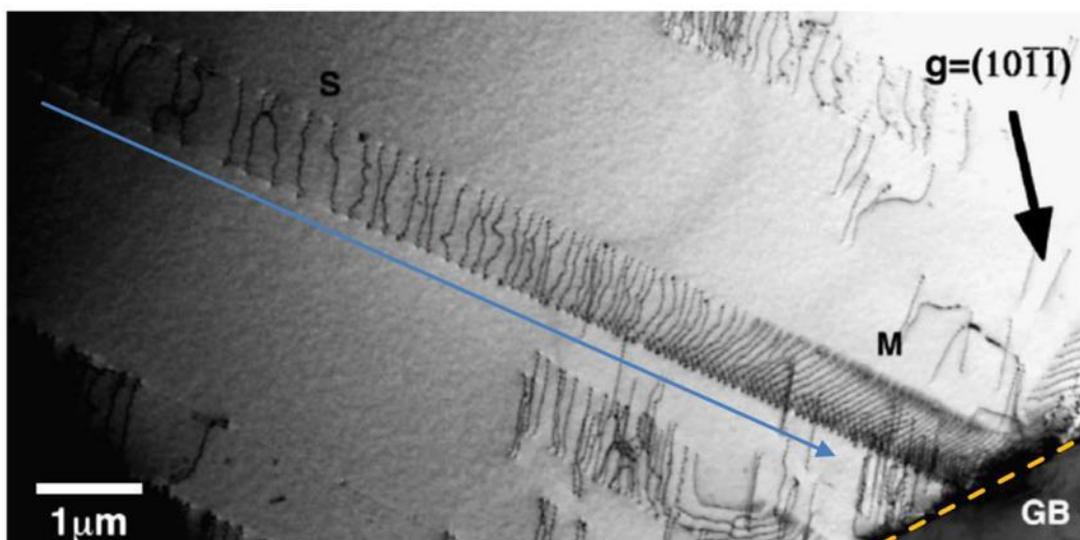


Abb. 2-26: Planarer Versetzungs-Pileup vor einer Korngrenze [Bran04]<sup>21</sup>

Es wäre jedoch ein Trugschluss anzunehmen, dass eine Korngrenze immer nur eine Barrierewirkung hat. Ganz im Gegenteil. Es besteht unter gewissen Voraussetzungen auch die Möglichkeit, dass Versetzungen durch die Korngrenze transmittieren. Nicht zu verwechseln jedoch mit dem Fall, dass Versetzungen in oder in der Nähe der Korngrenze nukleiert werden [Bail87]<sup>22</sup>. Letzteres könnte als eine Art Pseudo-Transmission verstanden werden. Der Unterschied zwischen echter und unechter Transmission wird bei

<sup>19</sup> „The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results“ E.O. HALL, *Proc. R. Soc. B64* (1951) 747-753

<sup>20</sup> „The Cleavage Strength of Polycrystals“ N.J. PETCH, *J. Iron Steel Inst.* 174 (1953) 25-28

<sup>21</sup> „Static recovery in titanium alloys at lower temperatures“ M. BRANDES, M.J. MILLS, *Material Science and Engineering A* 387-389 (2004) 570-575

<sup>22</sup> „Dislocation transmission through  $\Sigma=9$  symmetrical tilt boundaries in silicon and germanium“ X. BAILLIN, J. PELISSIER AND J.J. BACMANN, *Philosophical Mag. A*, Vol. 55, No. 2 (1987) 143-164

der Betrachtung der verschiedenen Versetzungs-Wechselwirkungsmechanismen an und in der Korngrenze deutlich.

Der Weg von Versetzungen durch Korngrenzen lässt sich gemäß Shen et al. in vier grundlegende unterschiedliche Mechanismen unterteilen [Shen88]<sup>23</sup>:

- a) **Nukleation an der Korngrenze**: Der Versetzungs-Pile-Up erzeugt infolge der lokalen Spannungsüberhöhung eine Versetzung an der Korngrenze, welche in den Kristall emittiert.
- b) **Transmission**: Die Versetzung passiert die Korngrenze, wobei eine „Rest“-Versetzung in der Korngrenze absorbiert wird.
- c) **Absorption**: Die Versetzung wird vollständig in der Korngrenze absorbiert.
- d) **Absorption und Emission**: Die Versetzung wird absorbiert und an einer anderen Stelle der Korngrenze wieder emittiert.

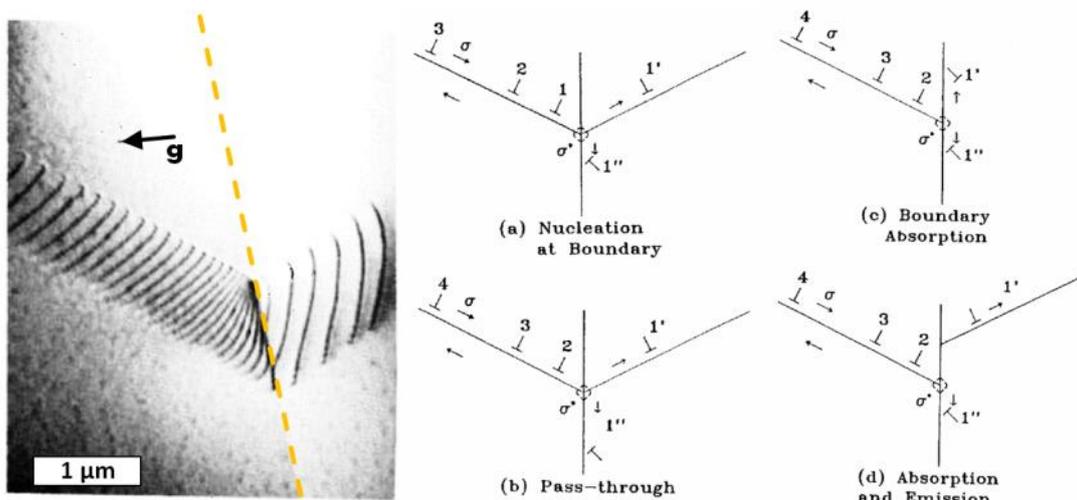


Abb. 2-27: TEM-Aufnahme transmittierender Versetzungen und Schema der vier Mechanismen nach Shen et al. [Shen88]

Alle vier Varianten, bis auf den Fall a), der Nukleation, haben gemein, dass, sowohl im Falle der (partiellen) Transmission, als auch bei der Absorption, notwendigerweise eine Restversetzung gemäß Gl.(12) in die Korngrenze eingebaut werden muss. Solche Korngrenzenversetzungen wurden u.a. von Bollmann, Silvestre und Bacmann untersucht [Boll81]<sup>24</sup>.

<sup>23</sup> „Dislocation and grain boundary interactions in metals“ Z. SHEN, R.H. WAGONER AND W.A.T. CLARK, *Acta Metalurgica*, Vol. 36, No. 12 (1988) 3231-3242

<sup>24</sup> „Partial secondary dislocations in germanium grain boundaries“ W. BOLLMANN, G. SILVESTRE AND J.J. BACMANN, *Philosophical Magazine A*, Vol. 43, No.1 (1981) 201-212

Lediglich für den Spezialfall der „vollständigen“ Transmission erfolgt das Passieren der Korngrenze ohne die Notwendigkeit des Einbaus einer Restversetzung, wie zum Beispiel im Falle einer Quergleit-Transmission (cross-slip), beschrieben durch Sutton und Balluffi [Sutt06]<sup>25</sup>. Beim Quergleiten bleibt der Burgersvektor erhalten, er wechselt lediglich die Gleitebene. Diese besondere Konstellation stellt jedoch einen Spezialfall dar, wie er beispielsweise im Falle einer  $\Sigma 3$ -Zwillingskorngrenze vonstattengehen kann. Denn diese Form der kristallübergreifenden Quergleitung ist nur möglich, wenn sich zwei benachbarte Gleitebenen genau in der Korngrenze schneiden und überdies die gleiche Gleitrichtung aktiv ist (vgl. Abb. 2-28).

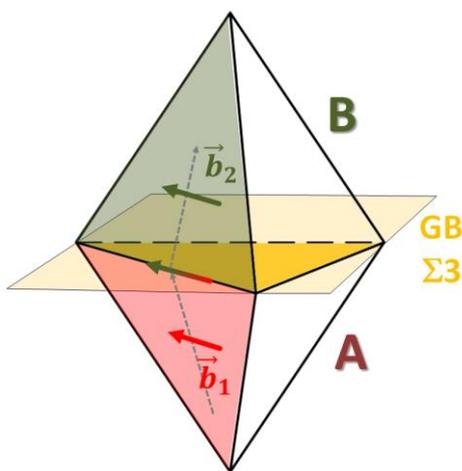


Abb. 2-28: Cross-Slip durch eine Zwillingskorngrenze

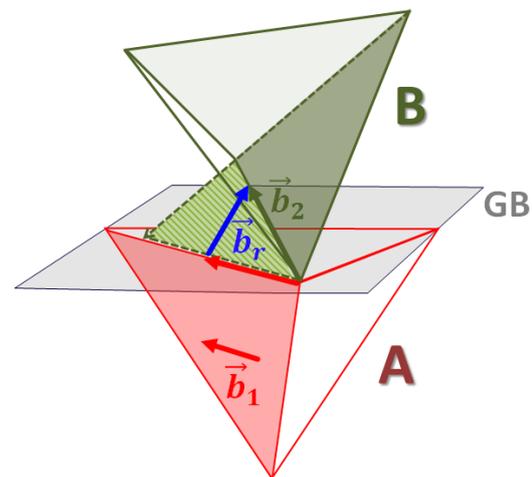


Abb. 2-29: Transmission unter Erzeugung eines Restburgersvektors

Betrachtet man den in Abb. 2-29 dargestellten abgewandelten Fall eines anders orientierten Tetraeders B, jedoch so, dass sich die Gleitebenen zwar immer noch in der Korngrenzebene schneiden, die Burgersvektoren jedoch nicht mehr kollinear sind, so ist reine Quergleitung nicht mehr möglich. Die Transmission erzwingt vielmehr die Erzeugung einer Restversetzung.

$$\vec{b}_r = \vec{b}_2 - \vec{b}_1 \quad (12)$$

Die Größe dieser Restversetzung, welche in der Literatur als Restburgersvektor oder im Englischen „residual Burgers vector“ bezeichnet wird, hat, wie im Folgenden dargelegt, maßgeblichen Einfluss auf den Widerstand der Korngrenze bezüglich möglicher Ver-

<sup>25</sup> „Interfaces in Crystalline Materials“ A.P. SUTTON AND R.W. BALLUFFI, *Clarendon Press Oxford* (1995) S.738ff

setzungstransmission. Der Zusammenhang zwischen Gleitkontinuität und der Stärke der an der Korngrenze zurückbleibenden Versetzungen konnte unter anderem auch durch experimentelle Arbeiten von Lim und Raj an gleichachsigen-symmetrischen Kippkorngrenzen in Nickelbikristallen bestätigt werden [Lim85]<sup>26</sup>.

Der Betrag des Restburgersvektors hängt zunächst einmal davon ab, welche beiden Gleitsysteme an der Korngrenze überhaupt miteinander in Wechselwirkung treten. Denn in den beteiligten Nachbarkristallen werden nicht nur die Gleitsysteme mit den höchsten Schmidfaktoren aktiviert, sondern darüber hinaus erfordern die makroskopischen Kontinuitätsbedingungen an der Korngrenze im Allgemeinen, dass sich die benachbarten Kristalle auf wenigstens vier Gleitsystemen verformen, die entweder zwei zu zwei oder drei zu eins auf die beiden Kristallite verteilt sein können [Livi57]<sup>27</sup>. Festzuhalten ist jedoch, dass die Restburgersvektoren möglicher Gleitsystemkopplung an sich unabhängig von der räumlichen Lage der Korngrenze sind. Ganz anders verhält es sich hingegen mit der Kopplung möglicher Gleitebenen. Die Art wie sich benachbarte Gleitebenen auf der Korngrenze schneiden hängt nämlich ganz entscheidend von deren Orientierung ab.

Dieser enormen Bedeutung der geometrischen Gegebenheiten an der Korngrenze für die Widerstandswirkung derselben gegenüber Gleittransmission tragen die Arbeiten von Lee, Robertson und Birnbaum Rechnung [Lee89]<sup>28</sup>. In ihrer Veröffentlichung „*Prediction of slip transfer mechanisms across grain boundaries*“ definieren sie drei Kriterien (Gleitebenenschnitte, Restburgersvektoren, Spannungen), welche die Vorhersage von Gleittransmission, sowie den daran beteiligten Gleitsystemen erlauben sollen.

Auf der Grundlage dieser Kriterien, die Lee et al. auf den Vorarbeiten von u.a. Shen, Wagoner und Clark entwickelt haben, beruht das gesamte in dieser Arbeit entwickelte geometrische Konzept der Korngrenze. Eine dezidierte Betrachtung dieser einzelnen Faktoren, zusammengefasst unter dem Begriff des LRB-Konzeptes, erfolgt in nachfolgenden Abschnitt.

---

<sup>26</sup> „Continuity of slip screw and mixed crystal dislocations across bicrystals of nickel at 573 K“ L.C. LIM, R. RAY, *Acta Metallurgica* 33 (1985) 1577

<sup>27</sup> „Multiple slip in bicrystal deformation“ J.D. LIVINGSTON, B. CHALMERS, *Acta Metallurgica* Vol. 5, Issue 6 (1957) 322-327

<sup>28</sup> „Prediction of slip transfer mechanisms across grain boundaries“ T.C. LEE, I.M. ROBERTSON AND H.K. BIRNBAUM, *Scripta Metallurgica*, Vol. 23 (1989) pp. 799-803

## 2.8 Das LRB-Konzept

Shen, Wagoner und Clark betrachteten einen Versetzungs-Pile-Up auf der „ankommenden“ Gleitebene und versuchten mittels zweier Kriterien vorherzusagen, welches Gleitsystem im angrenzenden Korn infolge des Pile-Ups aktiviert würde.

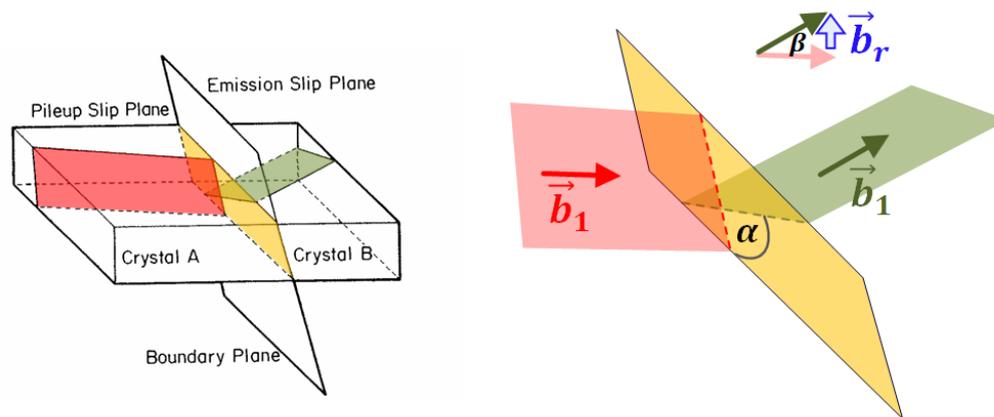


Abb. 2-30: links: Schema nach [Shen88], rechts: Nomenklatur der beteiligten Winkel

Die erste, die geometrische Bedingung, lautet: Der Winkel  $\alpha$  zwischen den Schnittlinien der Gleitebenen mit der Korngrenzenebene und der Winkel  $\beta$  zwischen ankommender und herausgehender Gleitrichtung sollen jeweils minimal sein (vgl. Abb. 2-30).

Die zweite Bedingung besagt, dass, nachdem die erste Bedingung die Wahl der Gleitebene festlegt, es die Gleitrichtung mit der maximalen Scherspannung<sup>29</sup> ist, die das schließlich zu aktivierende Gleitsystem definiert; bestehend aus Gleitebene und Gleitrichtung [Lee90]<sup>30</sup>.

Auch wenn Shen et al. mit Experimenten die Vorhersagen ihres Modells teilweise bestätigen konnten, beinhaltet das Modell eine logische Inkonsistenz, die Lee, Robertson und Birnbaum dazu bewogen haben ihr eigenes Modell – das LRB-Modell –, ergänzt um ein weiteres Kriterium, zu entwickeln. Das Problem von Shens Modell liegt darin, dass das Kriterium maximaler Scherspannung dazu führen kann, dass potentiell auch Gleitrichtungen vorhergesagt werden können, welche nicht in den geometrisch „bevorzugten“ Gleitebenen liegen, d.h. die erste Bedingung nicht erfüllt ist.

<sup>29</sup> Es handelt sich hierbei um die resultierenden Scherspannungen, die infolge des „ankommenden“ Versetzungs-Pile-Ups auf den benachbarten Gleitsysteme zum tragen kommen. Lee et al. [Lee90] berechnen diese anisotrop-elastisch mit einem Programm von Wagoner.

<sup>30</sup> „TEM in situ deformation study of the interaction of lattice dislocations with grain boundaries in metals“ T.C. LEE, I.M. ROBERTSON, H.K. BIRNBAUM, *Philosophical Magazine A*, Vol. 62, (1990) 131-153

Um, zum einen, diese Inkonsistenz zu beheben und, zum anderen, überdies den maßgeblichen Einfluss des Restburgersvektors zu berücksichtigen, basiert das Konzept von Lee auf drei Kriterien:

- 1) Die **geometrische Bedingung**: Der Winkel zwischen den Schnittlinien der Gleitebenen mit der Korngrenzenebene soll minimal sein.
- 2) Die **Scherspannung** auf dem aktivierten Gleitsystem soll maximal sein.
- 3) Der **Restburgersvektor** soll minimal sein.

Während Kriterium 1) die Wahl der Gleitebene definiert, bestimmen die Kriterien 2) und 3) die aktivierte Gleitrichtung und somit das Gleitsystem.

Während die Bedingungen 1) und 3) direkt intuitiv durch die vorliegende Geometrie zugänglich sind, verhält es sich mit der Scherspannung anders. Zwar lässt sich durch Angabe der Richtung der von außen angelegten Zugspannung über das Schmid'sche Schubspannungsgesetz die jeweils auf den Gleitsystemen resultierenden Scherspannungen ausrechnen. Jedoch gilt es darüber hinaus zu berücksichtigen, dass es an der Korngrenze selbst, infolge der anisotrop-elastischen Inkompatibilität der beiden benachbarten Kristallite zu zusätzlichen lokalen Spannungen kommt, welche sich der anliegenden Spannung überlagern. Das Ausmaß der Intensität dieses zusätzlichen Einflusses auf die lokalen Spannungsgegebenheiten ist im Vergleich zur Geometrie zunächst nicht unmittelbar zugänglich. Und noch komplizierter gestaltet sich die Situation bei Berücksichtigung des Spannungsfeldes in Folge des Pile-Ups.

Das Gesamtspannungsfeld an der Korngrenze resultiert letztlich aus der Überlagerung von dem als homogen angenommenen äußeren Spannungsfeld, den Inkompatibilitätsspannungen und dem Spannungsfeld des Pile-Ups:

$$\tau_i = \tau_{i,\text{extern}} + \tau_{i,\text{Inkomp}} + \tau_{i,\text{Pile-Up}} \quad (13)$$

Die jeweils, bedingt durch die äußere Belastung, auf den Gleitsystemen wirkenden Scherspannungen,  $\tau_{i,\text{extern}}$  erhält man durch Anwendung des Schmid'schen Schubspannungsgesetzes<sup>31</sup>,

$$\tau_{i,\text{extern}} = \sigma_{\text{extern}} \cdot SF_i \quad (14)$$

wobei sich die Schmidfaktoren wie folgt definieren:

---

<sup>31</sup> „Plasticity of Crystals with Special Reference to Metals“ E. SCHMID UND W. BOAS, *F.A. Hughes & Co. Limited London (1950)*

$$SF_i = \frac{\vec{E}_i \cdot \vec{Z}}{|\vec{E}_i| \cdot |\vec{Z}|} \cdot \frac{\vec{r}_i \cdot \vec{Z}}{|\vec{r}_i| \cdot |\vec{Z}|} \quad (15)$$

Dabei sind  $\vec{E}_i$  und  $\vec{r}_i$  die Gleitebenennormale bzw. die Gleitrichtung des jeweiligen Gleitsystems  $i$  und  $\vec{Z}$  die Richtung der Zugachse.

Die quantitative Erfassung der zusätzlich wirkenden Spannungen infolge einer vor einer Korngrenze befindlichen Versetzung (vgl. Abb. 2-31) oder gar ganzer Versetzungsanordnungen, wie es beispielsweise einem Pile-Up vor der Korngrenze der Fall ist (vgl. Abb. 2-32), übersteigt den Rahmen und gleichzeitig auch das Ziel dieser Arbeit. Es sei an dieser Stelle auf Simulationsrechnungen verwiesen, wie sie in der Fachliteratur, basierend auf den Theorien von Eshelby<sup>32</sup> und u.a. den Rechnungen von Tucker<sup>33</sup> ange stellt werden können.

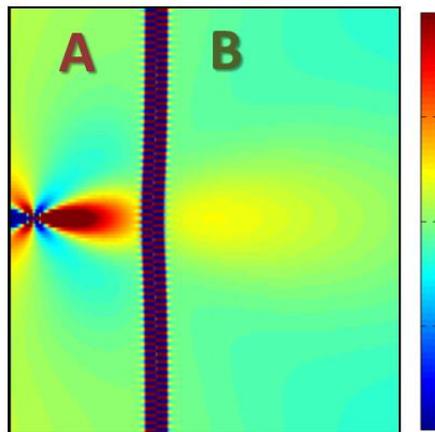


Abb. 2-31: Spannungsfeld (DDD-Simulation) einer Versetzung im Abstand vor einer Korngrenze. Farbskala: Spannungserhöhung (rot) – Verminderung (blau) [More08]<sup>34</sup>

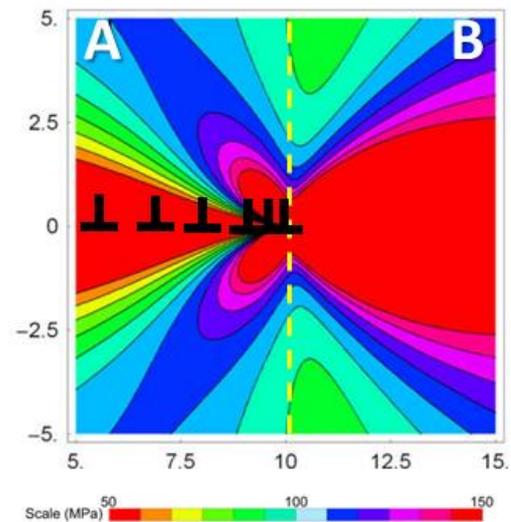


Abb. 2-32: Spannungsfeld Einfacher Pile-Up vor einer Korngrenze bestehend aus 144 Versetzungen (von links kommend) [Scho10]<sup>35</sup>

<sup>32</sup> „The Equilibrium of Linear Arrays of Dislocations“ J.D. ESHELBY, F.C. FRANK AND F.R.N. NABARRO, *Philosophical Magazine Series 7 Vol. 42, Issue 327 (1951)* 351-364

<sup>33</sup> „Plane boundaries and straight dislocations in elastically anisotropic materials“ M.O. TUCKER, *Philosophical Magazine, Vol. 19, Issue 163 (1969)* 1141-1159

<sup>34</sup> „Dislocation interactions mediated by grain boundaries“ P. MORETTI, L. LAURSON, M.J. ALAVA, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment P05010 (2008)* 1-13

<sup>35</sup> „The stress field of an array of parallel dislocation pile-ups: Implications for grain boundary hardening and excess dislocations distributions“ R. SCHOUWENAARS, M. SEEFELDT, P. VAN HOUTTE, *Acta Materialia 58 (2010)* 4344-4353

### 2.8.1 Betrachtung der Inkompatibilitätsspannungen

Infolge der elastischen Anisotropie verformen sich (zunächst rein elastisch) zwei unterschiedlich orientierte Körner trotz Beaufschlagung einer für beide gleichen äußeren Spannung verschieden stark, was zu zusätzlichen Spannung an der Grenzfläche führt, wie in Abb. 2-33 dargestellt. Die Veränderung des Spannungsfeldes in Korngrenznähe kann somit dazu führen, dass dort lokal andere bzw. zusätzliche Gleitsysteme aktiviert<sup>36</sup> werden, wie u.a. Hirth in seinen Arbeiten gezeigt hat (vgl. Abb. 2-34).

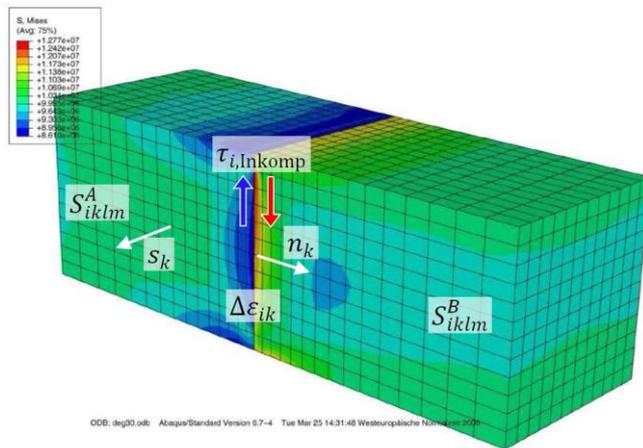


Abb. 2-33: Simulation der Inkompatibilitätsspannungen eines Bikristalls infolge der elastischen Anisotropie [Wels11]<sup>37</sup>

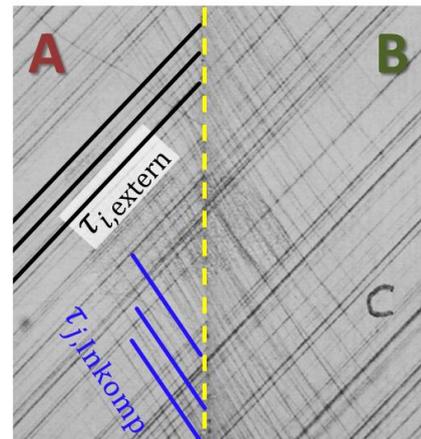


Abb. 2-34: Gleitlinien in der Nähe der Korngrenze eines Fe3%Si-Bikristalls [Hirt72]<sup>38</sup>

Eine Abschätzung dieser Zusatzspannungen (insbesondere an der Oberfläche) aufgrund der Korngrenzeninkompatibilität lässt sich hingegen in einer Form, wie sie Waltersdorf (ebenfalls an Bikristallen mit ebenen und geneigten Korngrenzen) in seiner Doktorarbeit durchgeführt hat, wie folgt zusammengefasst darstellen [Walt90]<sup>39</sup>.

Ein stetiger Übergang der Oberflächen an der Korngrenze bedeutet, dass die drei Dehnungsdifferenzen  $\Delta\varepsilon_{ik}$  in der Korngrenzebene mit der Normalen  $n_k$  kompensiert werden müssen,

$$-\Delta\varepsilon_{ik}n_k = (S_{iklm}^A - S_{iklm}^B) \sigma_{lm}^{KG} n_k \quad (16)$$

<sup>36</sup> Hierbei ist zu unterscheiden zwischen einer Gleitsystemaktivierung aufgrund elastischer Inkompatibilitätsspannungen zum einen und zum anderem einer Aktivierung infolge der Verformungsinkompatibilität

<sup>37</sup> „Bildung von Mikrorissen an Korngrenzen – Einfluss der Orientierung auf lokale Oberflächenspannungen und auf die Ermüdungsrisssbildung“ Dissertation M.T. WELSCH, Saarbrücken (2011) S. 96

<sup>38</sup> „The Influence of Grain Boundaries on Mechanical Properties“ J.P. HIRTH, *Metallurgical Transactions Vol. 3* (1972) 3047-3067

<sup>39</sup> „Interkristalline Spannungsrißkorrosion und Korrosionsermüdung an FeSi 2,8% Ein-, Bi- und Polykristallen“ Dissertation J. Waltersdorf, Düsseldorf (1990) 36-38

wobei  $S_{iklm}$  die Steifigkeiten der benachbarten Körner sind und  $\sigma_{im}^{KG}$  die in der Korngrenzebene wirkenden Spannungen.

Die Bedingung, dass die Summe aller Kräfte auf der Korngrenzenfläche verschwinden

$$\sigma_{ik}^{KG} n_k = 0 \quad (17)$$

definiert zusammen mit Gleichung (16) ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung die Komponenten des zusätzlichen Tensors  $\sigma^{KG}$  liefert, der die Oberflächenkräfte  $F_i^A$  und  $F_i^B$  auf den Seitenflächen von Korn A bzw. Korn B produziert.

$$F_i^A = \sigma_{ik}^{KG} S_k = -F_i^B \quad (18)$$

Die Kompensationskräfte dieser Kräfte sind es letztlich, die in dem jeweils betrachteten Gleitsystem  $i$  zu einer zusätzlichen Scherspannung  $\tau_{i,Inkomp}$  führen (vgl. Abb. 2-34).

$$\tau_{i,Inkomp} = -\rho \cdot \sigma_{\text{extern}} \cdot F_i \cdot b_i \quad (19)$$

Abhängig davon wie detailliert und in wie weit überhaupt die einzelnen Anteile zum Gesamtspannungsfeld berücksichtigt werden, gestaltet sich die Berechnung der Aktivierung möglicher Gleitsysteme. Diese erfolgt nach **Shen et al.**, indem mittels der Peach-Köhler-Kraft<sup>40</sup> die resultierenden Kräfte auf sogenannte „Testversetzungen“ berechnet werden, die jeweils in den möglichen Gleitsystemen liegen. Kombiniert man nun diese Ergebnisse mit den geometrischen Kriterien für einen möglichen Gleit-Transfer, kann auf diese Weise überprüft werden, ob die tatsächlich im Nachbarkorn aktivierten Gleitsysteme mit den Vorhergesagten (also berechneten) übereinstimmen, wie die Experimente von **Shen und Lee** gezeigt haben.

Jedoch bleibt die Frage, welche Effekte in jenen Fällen vorliegen, bei denen diese Übereinstimmung nicht zutrifft. Ginge man z.B. davon aus, dass die Einflüsse der rein geometrischen Kriterien und auch die vorherrschenden Spannungsverhältnisse vollumfänglich bekannt wären, so bliebe die Frage, wie der Einfluss des zunächst rein mathematisch definierten Restburgersvektors einzuschätzen ist, dessen Charakter als Gitterstörung letztlich auch einen energetischen Aspekt mit sich bringt. Hierzu soll der folgende Unterabschnitt einen Blick auf die energetischen Rahmenbedingungen der Korngrenze geben.

---

<sup>40</sup> „Theory of Dislocations“ J.P. HIRTH AND J. LOTHE, Second Edition, *Krieger Publishing Company Malabar, Florida (1982)* S.91

## 2.8.2 Betrachtung des energetischen Aspekts

Um die tatsächlichen physikalischen Prozesse an bzw. in der Korngrenze beschreiben zu können, ist eine Betrachtung auf kleinster Skala, nämlich der atomistischen Ebene, notwendig [Sang10a]<sup>41</sup>. Mittels molekulardynamischer Simulationen lassen sich die energetischen Verhältnisse der Korngrenze in Abhängigkeit ihrer Lage und der Orientierung der benachbarten Kristallite modellhaft beschreiben [Plim95]<sup>42</sup>. Als Beleg für die gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment kann beispielsweise die Stapelfehlerenergie von Nickel herangezogen werden, deren in einer Simulation von Donald J. Siegel berechneten Wert von 127 mJ/m<sup>2</sup> marginal von den experimentellen Werten, die im Bereich zwischen 125–128 mJ/m<sup>2</sup> liegen, abweicht [Sieg05]<sup>43</sup>.

Die Energien von Korngrenzen lassen sich besonders gut berechnen für die Fälle in denen eine CSL-Konfiguration eintritt, da sich diese mathematisch exakt beschreiben lassen. Wie die Korngrenzenenergie mit der Missorientierung zweier Körner variiert, kann man sich anschaulich vorstellen, indem man sich beispielsweise eine Drehkorngrenze vorstellt und die beiden Nachbarkristallite gegeneinander verdreht.

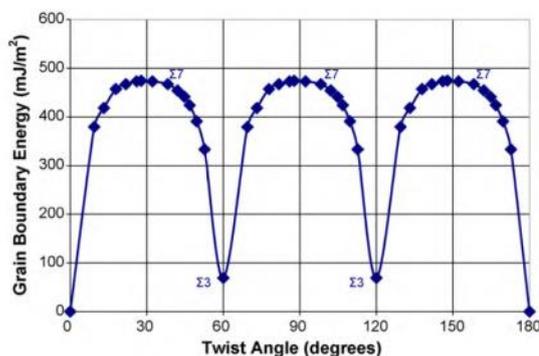


Abb. 2-35: Korngrenzenenergie als Funktion des Twistwinkels für Nickel in  $\langle 111 \rangle$  Orientierung [Sang10a]

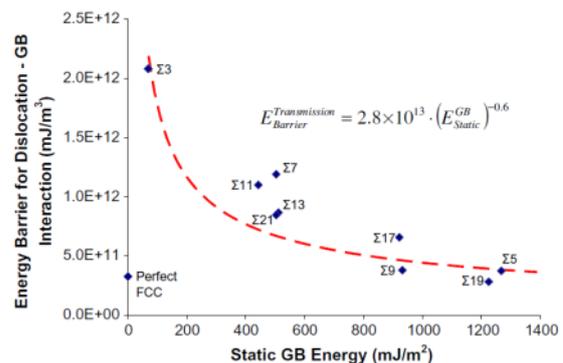


Abb. 2-36: Energiebarriere für Gleitung durch die Korngrenze für verschiedene CSL-Typen [Sang11a]<sup>44</sup>

Bei dieser Betrachtungsweise ändert sich die geometrische Struktur der Korngrenze in Abhängigkeit des Twistwinkels. Beim Drehen um die  $\langle 111 \rangle$ -Achse wird bei einem Winkel von 60° (und ganzzahligen Vielfachen davon) gerade die CSL-Σ3-Konfiguration erreicht, die aufgrund ihrer besonderen Symmetrie und der damit einhergehenden

<sup>41</sup> „Grain boundary characterization and energetics of superalloys“ M.D. SANGID, H. SEHITOGLU, H.J. MAIER, T. NIENDORF, *Materials Science and Engineering A* 527 (2010) 7115-7125

<sup>42</sup> „Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics“ S. PLIMPTON, *Journal of Computational Physics* 117 (1995) 1-19

<sup>43</sup> „Generalized stacking fault energies, ductilities, and twinnabilities of Ni and selected Ni alloys“ D.J. SIEGEL, *Applied Physics Letters* 87, 121901 (2005)

<sup>44</sup> „Energy slip transmission and nucleation at grain boundaries“ M.D. SANGID, T. EZAZ, H. SEHITOGLU, I.M. ROBERTSON, *Acta Materialia* 59 (2011) 283-296

periodischen Ordnung der Grenzfläche zu einer besonders niedrigen statischen Korngrenzenenergie führt. Die Simulationen von **Sangid et al.** haben gezeigt, dass die Energiebarriere einer Korngrenze bezüglich Slip-Transfer signifikant von der Struktur der Korngrenze abhängt und eine Korrelation zwischen Energiebarriere und der Korngrenzenenergie besteht. Korngrenzen mit niedriger statischer Grenzflächenenergie zeigen dabei hohe Energiebarrieren für die Versetzungstransmission [**Sang11a**]. Eine Erklärung hierfür könnte in dem Zusammenhang zwischen dem strukturellen Aufbau der Korngrenze und der damit einhergehende Energie liegen. Je geordneter die Atome im Korngrenzenbereich zusammenliegen, desto geringer der Spielraum für mögliche (einen potentiellen Slip-Transfer tragende) Versetzungsreaktionen.

Um die Möglichkeit von Gleit-Transfer-Prozessen zu berechnen haben **Sangid, Maier und Sehitoglu** die Wechselwirkung von persistenten Gleitbändern (PSBs) mit Korngrenzen aus der Perspektive der beteiligten Energien betrachtet. Ihrem Energiemodell liegt die folgende Energiebilanz zugrunde [**Sang11b**]<sup>45</sup>:

$$E = -E_{\sigma} - E_{\text{hard}} + E_{\text{Pileup}} + E_{\text{Nucl}} + E_{\text{PSB,GB}} + E_{\text{LAGB}} + E_{\text{APB}} + E_{\text{SF}} \quad (20)$$

Energieanteile bzgl.:  $\sigma$ : von außen angelegter Spannung, **hard**: Verfestigung, **Pileup**: Versetzungsaufstau, **Nucl**: Versetzungsnukleation, **PSB,GB**: Wechselwirkung PSB mit Korngrenze, **LAGB**: (Kleinwinkel-)Korngrenzenenergie, **APB**: Antiphasengrenzen, **SF**: Stapelfehler

Mithilfe dieser Energiebilanz lässt sich – analog zum klassischen Bruchkriterium von Griffith<sup>46</sup> – eine Ableitung nach dem Inkrement der Gleitung,  $x_i$ , bilden:

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = 0 \quad (21)$$

Die Nullstelle dieses Kriteriums gibt dann das energetische Minimum für die Anordnung der PSB-Struktur an, welche sich aus den einzelnen Versetzungen  $i$  zusammensetzt. D.h. die Gesamtenergiebilanz der Wechselwirkung von PSB und Korngrenze entscheidet darüber, ob ein Passieren der Korngrenze energetisch sinnvoll ist oder nicht. Um die Aussagekraft ihrer Simulationen zu prüfen haben **Sangid et al.** ihre Berechnungen den Vorhersagen, die das Geometrie-Konzept von Lee et al. (LRB-Kriterium)

<sup>45</sup> „An energy-based microstructure model to account for fatigue scatter in polycrystals“ M.D. SANGID, H.J. MAIER, H. SEHITOGLU, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 59 (2011) 595-609

<sup>46</sup> „The Phenomena of Rupture and Flows in Solids“ A.A. GRIFFITH, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, Vol. 221* (1921) 163-198

macht, (wie in der nachfolgenden Abb. 2-37 gezeigt) gegenübergestellt und festgestellt, dass die Anwendung beider Konzepte zu den gleichen Resultaten führen [Sang11a].

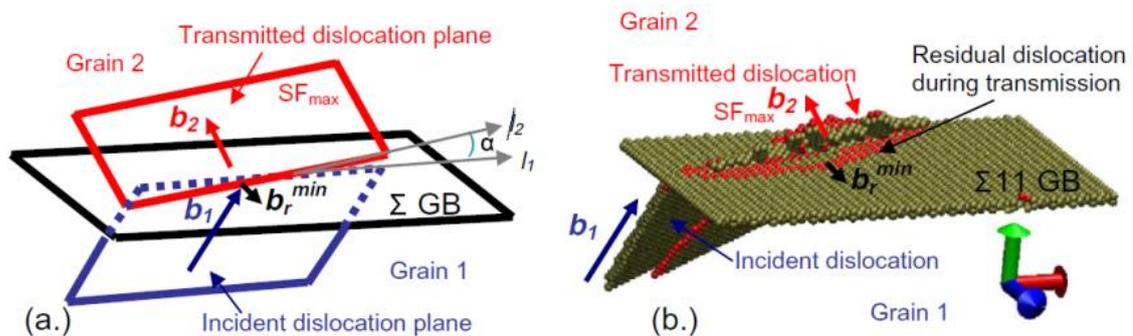


Abb. 2-37: Vergleich von LRB-Konzept und Energie-Konzept [Sang11a]

Dies ist bemerkenswert, wenn man bedenkt, dass den energetischen Eigenschaften der Korngrenze im LRB-Konzept keinerlei Rechnung getragen wird. Einzig die Tatsache, dass der Restburgersvektor möglichst klein soll, lässt Raum für eine teilweise energetische Interpretation, wenn man davon ausgeht, dass dieser Restburgersvektor im Falle einer Transmission in die Korngrenze eingebaut werden muss und dies eher gelingt, wenn ein solcher zusätzlicher Energieeintrag in die Korngrenze möglichst minimal ausfällt.

Ein Ansatz um den energetischen Aspekt der für die Transmission nötigen Burgersvektorreaktionen zu berücksichtigen verfolgen die Arbeiten von **Dewald und Curtin**, die ein modifiziertes LRB-Konzept entwickelt haben.

### 2.8.3 Das MLRB-Konzept

Neben der Forderung, dass der Schnittwinkel der Gleitebenen auf der Korngrenze minimal und die resultierende Schubspannung auf dem aktivierten Gleitsystem im Nachbarkorn maximal sein soll, fordert das LRB-Konzept, dass auch der Restburgersvektor (betragsmäßig) minimal sein soll. Eine nähere Betrachtung der letzten Forderung führt zu der Frage, ob nicht auch die Lage dieses Restburgersvektors von Bedeutung sein könnte. Da der Restburgersvektor in die Korngrenze eingebaut werden muss, stellt sich die Frage wie gut dessen Übereinstimmung mit möglichen Korngrenzenversetzungen (GBDs: Grain Boundary Dislocations) ist und insgesamt, wie dieser Mechanismus genauer betrachtet werden kann.

Diesen Schritt gehen die Arbeiten von **Dewald und Curtin** mit ihren modifizierten LRB-Kriterien (MLRB) [**Dewa11**]<sup>47</sup>. Sie stellen ergänzende Forderungen auf, die u.a. wie folgt lauten:

- 1) Die Komponente des Restburgersvektors, die aus der Korngrenze ragt soll minimal sein.
- 2) Die Passung zwischen Restburgersvektor und (eventuell vorhandener) Korngrenzenversetzung soll möglichst gut sein.
- 3) Die resultierende Scherspannung in der Korngrenze soll minimal sein.
- 4) Die Druckspannungen auf die Korngrenze sollen minimal sein.

Die Forderungen 1) und 2) beinhalten ein sogenanntes  $b^2$ -Kriterium, das die Möglichkeit zu einer Abschätzung geben soll, welche Versetzungsreaktion bei der Transmission energetisch bevorzugt erfolgen sollte. Dies kann man sich wie folgt vorstellen. Die Reaktion

$$b_1 \rightarrow b_2 + b_3 \quad (22)$$

ist dann energetisch günstig wenn gilt

$$b_1^2 > b_2^2 + b_3^2 \quad (23)$$

Übertragen auf den konkreten Fall einer  $\Sigma 3$ -Korngrenze, wäre ausgehend von einer „ganzen“ Versetzung in Korn A, unter gewissen Voraussetzungen die folgende Reaktion möglich, um eine Transmission zu erlauben:

$$\frac{a}{2}[10\bar{1}]_A \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]_{GBD} + \frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}]_B \quad (24)$$

Diese Reaktionsgleichung bildet letztlich die Gesamtbilanz des Transmissionsvorgangs ab. Die darin enthaltenen Zwischenschritte, bestehend aus Reaktionen von Shockley-Partialversetzungen, führen in diesem Spezialfall dazu, dass der eigentliche Restburgersvektor vollständig in einer Korngrenzenversetzung aufgeht, d.h. schließlich kein Restburgersvektor im eigentlichen Sinne übrig bleibt [**Dewa11**].

---

<sup>47</sup> „Multiscale modeling of dislocation/grain-boundary interactions: III. 60° dislocation impinging on  $\Sigma 3$ ,  $\Sigma 9$  and  $\Sigma 11$  tilt boundaries in Al“ M. DEWALD AND W.A. CURTIN, *Modelling and Simulations in Materials Science and Engineering 19 055002* (2011) 1-36

Im allgemeinen Fall lässt sich der Restburgersvektor nicht vollständig in eine Korngrenzenversetzung umwandeln, so dass effektiv ein Rest vom Restburgersvektor übrig bleiben muss. In diesen Fällen entscheidet dann wiederum die Größe dieses effektiven „Restes“, über die Güte der Einpassung in die Korngrenze.

Die Forderungen 3) und 4) stehen im Wesentlichen unter dem Einfluss der lokalen Spannungsgegebenheiten, wobei wiederum im Sonderfall einer kohärenten  $\Sigma 3$ -Zwillingskorngrenze die resultierende Scherspannung auf der Korngrenze leichter abgeschätzt werden kann, als die auf die Grenzfläche wirkenden Kompressionsspannungen, die eine Folge der Inkompatibilität sind.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das MLRB-Konzept als bislang umfangreichster Ansatz angesehen werden kann, ein Modell zu definieren, welches jeden der drei grundlegenden Teilaspekte, d.h. Geometrie, Spannungen und Energien, berücksichtigt.

Gleichzeitig steigt mit der Detailtiefe bezüglich möglicher Versetzungsreaktionen in der Korngrenze, insbesondere unter Einbeziehung von Shockley-Partialversetzungen, auch der Grad der Komplexität des Modells.

Um einen Kompromiss zwischen notwendiger Detailliertheit und gleichzeitiger Effektivität der beiden Modelle bezüglich ihrer Aussagekraft für die Vorhersage von Gleit-Transfer-Prozessen zu finden, ist eine Abschätzung nötig, welche Aspekte letztlich dominierenden Einfluss haben. Die geometrische Passung der Gleitsysteme auf der Korngrenze, die lokalen Spannungsfelder oder doch die energetischen Gegebenheiten?

Um dieser Fragestellung auf den Grund zu gehen, wird im folgenden Unterkapitel, auf zwei wesentliche Prozesse, die Rissinitiierung und den Risstransfer, eingegangen. Insbesondere auf deren Ausprägung im Experiment und wie sie ausgehend von ihrer historischen Entwicklung zum Gegenstand der aktuellen Forschung wurden. Ziel dieser Darstellung soll sein, Perspektiven aufzuzeigen, um neue geeignete Experimente und Konzepte zu definieren, wie sie im Hauptteil dieser Arbeit präsentiert werden.

## 2.9 Gleit-Transfer-Prozesse

Der Transfer von Gleitung, sprich, die Transmission von Versetzungen durch Korngrenzen bzw. auch der umgekehrte Fall, das Blockieren von Versetzungen, sind in mehrfacher Hinsicht von besonderem Interesse. Zum einen, aus der materialphysikalischen Perspektive gesehen, interessieren uns die grundlegenden Mechanismen auf der atomaren Ebene. Die innere Struktur von Korngrenzen ist nach wie vor nur schwer zugänglich und gleichsam im Allgemeinen von sehr komplexer Gestalt. In diesem Sinne kann man die Untersuchung von Gleit-Transfer-Prozessen in einer ähnlichen Sichtweise sehen wie klassische Beugungsexperimente. Man schickt kleine „Teilchen“ in die eingangs erwähnte zu untersuchende „Black Box“ – die Korngrenze – und untersucht wie diese Teilchen dann „hinten raus kommen“. Anhand der Beobachtungen lassen sich dann eventuell Rückschlüsse über das Wesen der „Black Box“ ziehen.

Zum anderen, aus der materialwissenschaftlichen Perspektive, ist die Fähigkeit zur Versetzungstransmission (vgl. Abb. 2-38a) oder umgekehrt, dem Blockieren (vgl. Abb. 2-38b), von besonderem Interesse für den Aspekt der Materialschädigung. Denn die Korngrenze, als eine der wohl wesentlichsten Bausteine eines Gefüges, ist Hauptakteur bei zahlreichen unterschiedlichen Effekten, die für die lokale Mikrostrukturentwicklung entscheidend sind.

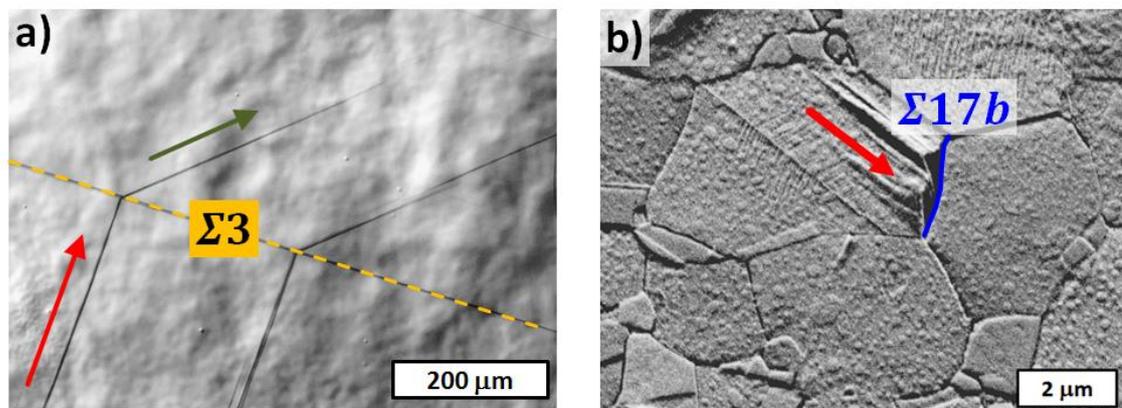


Abb. 2-38: a) Transmission von Gleitung durch eine Zwillingskorngrenze in grobkörnigem Nickel (Probe P3), sowie b) Blockierungswirkung ein  $\Sigma 17b$  Korngrenze in ultrafeinkörnigem Nickel (Probe P4)

Da die Korngrenze die intragranulare Versetzungsbewegung im Allgemeinen blockiert, kommt es zum Pile-Up, das Material verfestigt. Ebenso können auf diese Weise mikrostrukturelle Risse zum Stehen kommen, wenn die ihnen vorauseilende plastische Zone von der Korngrenze geblockt wird. Umgekehrt können Versetzungen aber eben auch die Korngrenze passieren, wobei dann ihre Bewegungsrichtung im Allgemeinen abgelenkt wird, da jenseits der Korngrenze per se eine andere Kristallorientierung vorliegt. Dieser

Prozess spielt insbesondere eine Rolle beim Übergang eines Risses von einem Korn in das andere. Andererseits können die genannten Effekte gerade auch zur Entstehung von Rissen führen. Zusammengefasst lässt sich also festhalten, dass die Korngrenze sowohl beim Transport, als auch bei der lokalen Entstehung von Materialschädigung maßgeblich beteiligt ist.

### 2.9.1 Rissinitiierung an der Korngrenze

In kubisch-flächenzentrierten Metallen erfolgt die Ermüdungsrissbildung vornehmlich über persistente Gleitbänder (PSBs). Treffen diese Versetzungsstrukturen auf Korngrenzen kommt es ebenfalls zum Aufstau und damit einhergehenden lokalen Spannungskonzentrationen, welche schließlich zu Extrusionen auf der Korngrenze führen (vgl. Abb. 2-39), was ein sukzessives Aufreißen der Grenzfläche zur Folge haben kann [Essm79]<sup>48</sup>, [Diff86]<sup>49</sup> (vgl. Abb. 2-40).

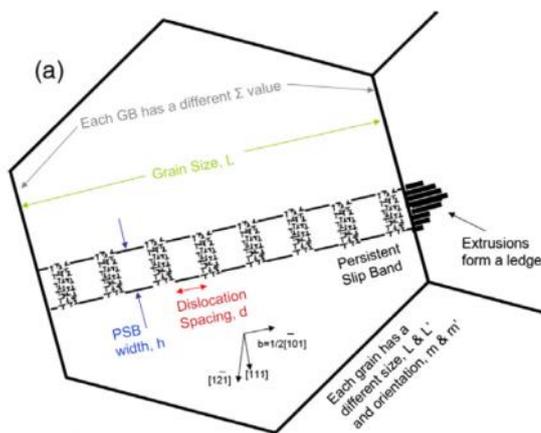


Abb. 2-39: Schematische Darstellung der Wechselwirkung von PSB-Strukturen mit Korngrenzen [Sang11c]<sup>50</sup>

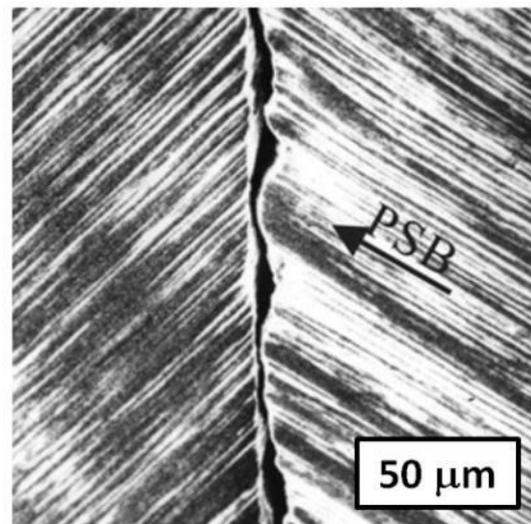


Abb. 2-40: Aufreißen der Korngrenze infolge von Extrusionen durch PSBs [Zhan11]<sup>51</sup>

<sup>48</sup> „Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities“ U. ESSMANN AND H. MUGHRABI, *Philosophical Magazine A*, Vol. 40, No. 6 (1979) 731-756

<sup>49</sup> „A model of extrusions and intrusions in fatigued metals II. Surface roughening by random irreversible slip“ K. DIFFERT, U. ESSMANN AND H. MUGHRABI, *Philosophical Magazine A*, Vol. 54, No. 2 (1986) 237-258

<sup>50</sup> „A physically based fatigue model for prediction of crack initiation from persistent slip bands in polycrystals“ M.D. SANGID, H.J. MAIER, H. SEHITOGLU, *Acta Materialia* 59 (2011) 328-341

<sup>51</sup> „Low-cycle fatigue-cracking mechanisms in fcc crystalline materials“ P. ZHANG, S. QU, Q.Q. DUAN, S.D. WU, S.X. LI, Z.G. WANG AND Z.F. ZHANG, *Philosophical Magazine* Vol. 91, No. 2 (2011) 229-249

Auch wenn die Korngrenze nicht in allen Fällen Ausgangspunkt für die Rissinitiierung ist, gehört sie im Vergleich zu den sonstigen im Material vorhandenen Inhomogenitäten typischerweise zu den „Fehlern“, die bei der Herstellung – gewollt oder ungewollt – am wenigsten reduziert werden. Deshalb steht die Rissinitiierung an der Korngrenze im Fokus zahlreicher Arbeiten, wobei sich die Ursachenforschung keineswegs nur auf die Wechselwirkung zwischen persistenten Gleitbändern und der Korngrenze beschränkt. Die Korngrenze an sich allein lässt sich bereits als Quelle einer „Störung“ der lokalen Spannungs- und Dehnungsfelder betrachten, wie die folgenden Betrachtungen zeigen sollen.

Das Ausmaß dieser verschiedenen Inkompatibilitäten hängt sowohl von der Orientierung der Nachbarkörner als auch der Lage und dem Charakter der Korngrenze ab. **Blochwitz et al.** haben gezeigt, dass hierbei insbesondere die Missorientierung zwischen beiden Nachbarkörnern eine wichtige Rolle spielt [**Bloc95**]<sup>52</sup>. Zunächst lässt sich der Grad der Missorientierung in zwei Kategorien einteilen: Kleinwinkelkorngrenzen (LAGBs, low angle grain boundaries) mit einer Missorientierung von weniger als 15°, sowie Großwinkelkorngrenzen (HAGB, high angle grain boundaries) bei entsprechend größeren Winkeln. Gemäß dieser Einteilung haben **Zhang et al.** experimentell nachgewiesen, dass LAGBs von PSBs passiert werden können und festgestellt, dass an diesen Korngrenzen keine Rissinitiierung stattfindet [**Zhan03**]<sup>53</sup>. Anders verhält es sich bei HAGBs, welche im Allgemeinen keine Transmission von PSBs erlauben was jedoch nicht zwingenderweise zu einer Rissentstehung an der Korngrenze führen muss [**Zhan00a**]<sup>54</sup>.

Ebenso besteht die Möglichkeit, dass es zu intragranularer Rissinitiierung kommt. Letztlich hängt laut **Zhang und Wang** der genaue Mechanismus der Rissentstehung davon ab, wie sich die Lage der Korngrenzenebene zur Spannungsrichtung verhält. Die Arbeiten von **Zhang et al.** zusammenfassend, lässt sich festhalten, dass sich die Wechselwirkungen zwischen PSBs und Korngrenze in drei Kategorien einteilen lassen: Das Passieren der Korngrenze (vgl. Abb. 2-41a), das Blockieren durch die Korngrenze (Pile-Up) (vgl. Abb. 2-41b), sowie ein teilweises Passieren [**Zhan00b**]<sup>55</sup>.

---

<sup>52</sup> „Misorientation measurements near grain boundary cracks after fatigue tests“ C. BLOCHWITZ, J. BRECHBÜHL AND W. TIRSCHLER, *Strength of Materials*, Vol. 27, Nos. 1-2 (1995) 1-12

<sup>53</sup> „What types of grain boundaries can be passed through by persistent slip bands?“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG AND J. ECKERT, *J. Mater. Res.*, Vol. 18, No. 5 (2003) 1031-1034

<sup>54</sup> „Comparison of fatigue cracking possibility along large- and low-angle grain boundaries“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG, *Materials Science and Engineering*, A284 (2000) 285-291

<sup>55</sup> „Relationship between the fatigue cracking probability and the grain-boundary category“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG, *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 80, No. 7 (2000) 483-488

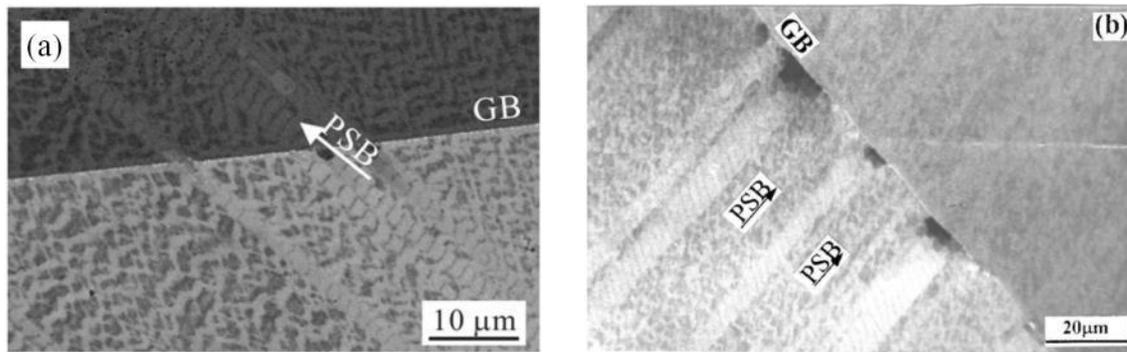


Abb. 2-41: a) Passieren der Korngrenze [Zhan11] und b) Blockierung der PSBs an der Korngrenze [Zhan00b]

Das teilweise Passieren einer Korngrenze ist ein sehr komplexer Vorgang, der zum einen stark von der geometrischen Lage der Korngrenze und zum anderen von deren Charakter abhängig ist. Denn die partielle Transmission geht stets mit einem Restburgersvektor einher, der sozusagen in der Korngrenze verbleibt bzw. dort „eingebaut“ werden muss. Dieser „Einpassungsvorgang“ macht ersichtlich, dass dieser Mechanismus nur bei Kenntnis der exakten Korngrenzengeometrie beschreibbar ist. Im Falle von CSL- $\Sigma$ -Korngrenzen ist dies beispielsweise möglich. Einen Spezialfall stellt die kohärente  $\Sigma 3$ -Zwillingskorngrenze (CTB, coherent twin boundary) dar, welche sich einerseits mathematisch vollständig beschreiben lässt und andererseits vor allem auch in vielen experimentellen Arbeiten als bevorzugter Ausgangsort für Rissentstehung identifiziert wurde [Hash99]<sup>56</sup>.

Der Titel einer Veröffentlichung aus dem Jahre 2008 von **Qu et al.** bringt die sich stellende Frage auf den Punkt „*Twin boundaries: Strong or weak?*“ [Qu08]<sup>57</sup>. Machen Zwillingskorngrenzen ein Gefüge fester, oder ist das Gegenteil der Fall?

Für die weitere Betrachtung dieser Frage ist zunächst die grundlegende Unterscheidung zwischen einsinniger und zyklischer Belastung nötig, weshalb im Rahmen dieser Arbeit beide Szenarien betrachtet werden. Während erstere vornehmlich dem Studium der prinzipiellen Vorgänge und Mechanismen dient, sind es schließlich doch die Ermüdungsprozesse, welche wegen ihrer Anwendungsbezogenheit von größerer Relevanz sind. Hierbei richtet sich der Blick auf die Bildung von Ermüdungsrissen in Zusammenhang mit Korngrenzen, deren Transmission- bzw. Blockierungsverhalten maßgeblich beeinflusst, ob und auf welcher Art und Weise es zur Rissinitiierung kommt. An dieser Stelle sei zu erwähnen, dass der Schluss, rein von der Tendenz zur Transmission/Blockierung auf die Resistenz gegenüber der Rissbildung zu schließen, deutlich zu

<sup>56</sup> „Fatigue Crack Nucleation at  $\Sigma 3(112)$  Boundary in a Ferritic Stainless Steel“ S. HASHIMOTO, H. IKEHATA, A. KATO AND H. KATO, *Interface Science* 7 (1999) 159-171

<sup>57</sup> „Twin boundaries: Strong or weak?“ S. QU, P. ZHANG, S.D. WU, Q.S. ZANG AND Z.F. ZHANG, *Scripta Materialia* 59 (2008) 1131-1134

kurz greift. Dieser Versuch der Vereinfachung ist so leider nicht möglich und hat deshalb in der Literatur zu gegenläufigen Interpretationen geführt, wie sie letztlich in der vorhergehend gestellten Frage kurz aber prägnant zum Ausdruck kommt. Ob eine Zwillingskorngrenze nun eher einen starken oder vielmehr doch einen schwachen Widerstand bezüglich Ermüdung hat, lässt sich erwartungsgemäß so pauschal nicht beantworten. Letztlich sind beide Varianten möglich, deren Ausprägung im Detail liegen und nicht alleine im Zwillingscharakter der Korngrenze begründet sind.

Die beiden folgenden Abbildungen zeigen, wie die Zwillingskorngrenze auf zwei verschiedene Arten als Rissentstehungsort fungieren kann.

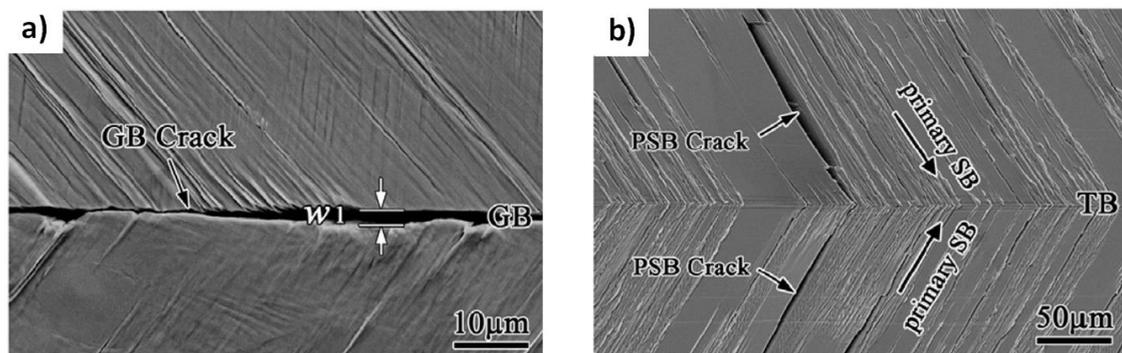


Abb. 2-42: Rissinitiierung durch Aufreißen (a) der Korngrenze oder (b) eines PSB [Li13]<sup>58</sup>

Ein Aufreißen der Korngrenze infolge beidseitig einlaufender PSBs (vgl. Abb. 2-42a) ließe sich u.a. durch die Gleitsysteminkompatibilität auf der Korngrenze erklären. Ebenso auch die Bildung eines Gleitbandrisses infolge der Blockierung eines PSBs, wie in Abb. 2-42b dargestellt. In beiden Fällen wäre also die Hinderniswirkung der Korngrenze ursächlich für die Rissbildung. Läge hingegen eine Tendenz zur Transmission vor, könnten Versetzungen beispielsweise durch Quergleitung zwischen den Zwillingen wechseln, ohne dass es zu Aufstauungen käme. D.h. die Gleitung könnte die Korngrenze passieren. Umgekehrt kann aber auch gerade diese Transmission dazu führen, dass sich verhältnismäßig mehr Gleitung in einem PSB lokalisiert, als das im Falle der Blockierung wäre. Ein weiterer Schädigungsmechanismus wäre die Gleitung entlang der Zwillingskorngrenze, die ja ihrerseits ebenfalls eine Gleitebene darstellt (bei Kohärenz). Die genannten Aspekte machen also deutlich, dass die im Raum stehende Fragestellung, ob die Zwillingskorngrenze das Gefüge nun ermüdungsresistenter macht oder eben nicht, nur unter Berücksichtigung der im Einzelfall vorliegenden lokalen Kristall- und Korngrenzenorientierungen sinnvoll beantwortet werden kann.

<sup>58</sup> „Effect of crystallographic orientation and grain boundary character on fatigue cracking behaviors of coaxial copper bicrystals“ L.L. LI, P. ZHANG, Z.J. ZHANG, Z.F. ZHANG, *Acta Materialia* 61 (2013) 425-438

Diese Betrachtung im Detail und deren aus geometrischer Sicht vollumfängliche Erfassung und daran anschließende quantitative Bewertung wird im Hauptteil dieser Arbeit, der Darstellung der *STRONG*-Methode, beschrieben.

Der Einfluss der Korngrenze beschränkt sich jedoch keineswegs nur auf die Phase der Rissentstehung. Insbesondere das unmittelbar nach der Initiierung stattfindende Mikrorisswachstum wird ebenfalls stark durch die Wechselwirkung mit Korngrenzen beeinflusst und hat somit weiterhin maßgebliche Bedeutung für den weiteren Verlauf der Gefügeschädigung. Deshalb widmet sich der folgende Unterabschnitt einer knappen Darstellung der Wechselwirkung zwischen Mikroriss und Korngrenze.

### 2.9.2 Rissausbreitung über Korngrenzen

Bei genauer, also lokaler, Betrachtung zeigt sich, dass es letztlich die einem Riss vorausseilende plastische Zone ist, welche beim Wachstum zunächst in den Wechselwirkungsbereich der Korngrenze gelangt und auf diese Weise deren Einfluss spürt. Deshalb betrachten die bekannten Rissmodelle den Riss stets in Zusammenhang mit dessen Bereich vor der Risspitze, in dem es in Folge der vom Riss verursachten Spannungsüberhöhung zu Gleitsystemaktivitäten kommt, welche die Schädigung letztlich vorantreiben.

Im einfachsten Fall beschränkt sich diese Aktivität auf die Gleitung innerhalb eines Gleitbandes. Basierend auf dem Modell von **Bilby, Cottrell und Swinden**<sup>59</sup> werden sowohl der Riss, als auch die plastischen Zonen vor den Rissspitzen mittels einer Versetzungsdichteverteilung beschrieben, wie sie schematisch in Abb. 2-43 zu sehen ist.

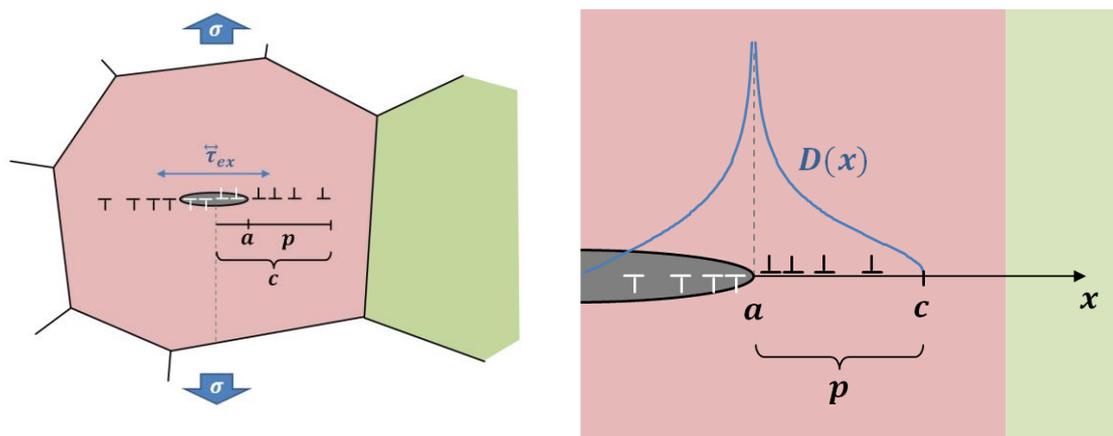


Abb. 2-43: Schematische Konfiguration bestehend aus Risskerbe, Risspitze  $a$ , plastischer Zone  $p$  und der Versetzungsdichteverteilung  $D(x)$  im Fall des sogenannten „Equilibrium Slip Band“ (ESB-Fall), also einem Gleichgewichtszustand, der sich gemäß Gleichung (25) noch ohne Einfluss der Korngrenze zum Nachbarkorn (grün) einstellt

<sup>59</sup> „The spread of plastic yield from a notch“ B.A. BILBY, A.H. COTTRELL AND K.H. SWINDEN, *Proc. R. Soc. London A* (1963) 304-314

Diese kontinuierliche Versetzungsverteilung entsteht aufgrund der extern angelegten Spannung  $\sigma_{ex}$  bzw.  $\tau_{ex}$  und kompensiert diese zugleich. Somit liegt der folgende Gleichgewichtszustand vor,

$$\tau_{ex} - \tau_r - \tau_f = 0 \quad (25)$$

wobei  $\tau_f$  die Reibspannung (*engl. friction stress*) des Gitters ist und  $\tau_r$  gerade der Rückspannung entspricht, welche die Versetzungsanordnung hervorruft.

$$\tau_r \propto \int_a^c \frac{D(x')}{x-x'} dx' \quad (26)$$

Die Integration erfolgt über die Versetzungsdichteverteilung  $D(x')$  im Bereich der plastischen Zone, also von der Rissspitze  $a$ , bis zum Ende der plastischen Zone  $c$ . Die Versetzungsdichteverteilung ergibt sich zu

$$D(x) = \frac{\tau_f}{\pi^2 A} \ln \left| \frac{x\sqrt{c^2 - a^2} + a\sqrt{c^2 - x^2}}{x\sqrt{c^2 - a^2} - a\sqrt{c^2 - x^2}} \right| \quad (27)$$

Anhand des Kurvenverlaufs in Abb. 2-43 (rechts) erkennt man, dass die Theorie zu singulären Versetzungsdichten beidseits der Rissspitze führt. Unabhängig von der Beurteilung dieser Singularität, lässt sich jedenfalls festhalten, dass die Versetzungsdichte in unmittelbare Nähe der Rissspitze maximal wird und dann zum Ende der plastischen Zone hin immer kleiner und schließlich zu Null wird.

Bei Kenntnis der Reibspannung des Gitters lässt sich die Größe der plastischen Zone gemäß der folgenden Gleichung bestimmen

$$p = c - a = c \cdot \left(1 - \frac{a}{c}\right) = c \cdot \left(1 - \cos \frac{\pi \tau_{ex}}{\tau_f}\right) \quad (28)$$

**Tanaka et al.** bezeichnen dieses Szenario als ESB-Fall (Equilibrium Slip Band), d.h. das Gleitband breitet sich frei ins Korn aus. Eine Wechselwirkung mit der Korngrenze findet nicht statt (vgl. Abb. 2-43).

Wenn jedoch nun bei weiterem Rissfortschritt, die dem Riss vorausliegende Versetzungsverteilung in den Einflussbereich der Korngrenze gelangt, verliert Gleichung (28) ihre Gültigkeit, da nun das Szenario des blockierten Gleitbandes (Blocked Slip Band) eintritt (BSB-Fall). Ganz analog zum Hall-Petch-Effekt bildet sich vor der Korngrenze ein Versetzungs-Pileup, sobald das Ende der plastischen Zone die Korngrenze erreicht, d.h.  $c = d$ .

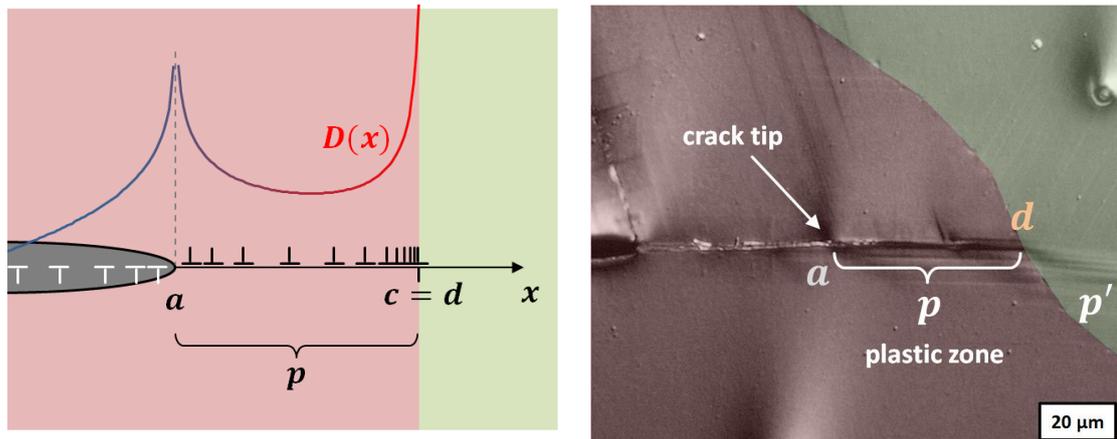


Abb. 2-44: BSB-Fall: Blockierung der plastischen Zone  $p$  durch die Korngrenze verbunden mit einem Pile-Up der Versetzungsdichtefunktion  $D(x)$

Gemäß Tanaka ändert sich die Versetzungsdichteverteilung um einen weiteren Term, der gerade diesem Einfluss der Korngrenze Rechnung trägt. Die Versetzungsdichtefunktion lautet dann

$$D(x) = \frac{\tau_f}{\pi^2 A} \ln \left| \frac{x\sqrt{c^2 - a^2} + a\sqrt{c^2 - x^2}}{x\sqrt{c^2 - a^2} - a\sqrt{c^2 - x^2}} \right| + \frac{\kappa \cdot \tau_{ex}}{\pi A} \frac{x}{\sqrt{d^2 - x^2}} \quad (29)$$

mit dem Faktor  $\kappa$

$$\kappa = 1 - \frac{2\tau_f}{\pi\tau_{ex}} \arccos\left(\frac{a}{c}\right) \quad (30)$$

Der zweite Summand in Gleichung (29) beschreibt den Pile-Up, wie er sich vor der Korngrenze bildet (vgl. Abb. 2-44 links). Außerdem ist zu beachten, dass dieser zusätzliche Term von der äußeren angelegten Spannung  $\tau_{ex}$  beeinflusst wird und somit maßgeblich die Intensität des Pile-Ups mitbestimmt. Dieser Umstand begründet die von Tanaka eingeführte Definition eines mikroskopischen Spannungsintensitätsfaktors  $K^m$ ,

der im Endeffekt aus dem klassischen Spannungsintensitätsfaktor ( $SIF$ ) besteht, lediglich ergänzt um den Faktor  $\kappa$ .

$$K^m = \kappa \cdot \tau_{ex} \sqrt{\pi c} \quad (31)$$

Ein Kriterium für die Transmission von Versetzungen lässt sich nun an einen kritischen mikroskopischen Spannungsintensitätsfaktor ( $mSIF$ ) koppeln. Auf diese Weise ergibt sich eine Größe, welche im Gegensatz zum klassischen Spannungsintensitätsfaktor in der Paris-Gleichung eben auch in der Lage ist, den Einfluss von mikrostrukturellen Gefügebarrieren abzubilden (vgl. Abb. 2-45). Interpretiert man den  $mSIF$  als die das Risswachstum kontrollierende Größe, erklärt sich die Verlangsamung der Rissausbreitung vor einer Korngrenze, wie sie bspw. in Abb. 2-45 (rechts) zu sehen ist, durch eine Verringerung der mikroskopischen Spannungsintensität. Wobei diese Verringerung eine Folge der Rückwirkung der vor der Korngrenze aufgestauten plastischen Zone ist.

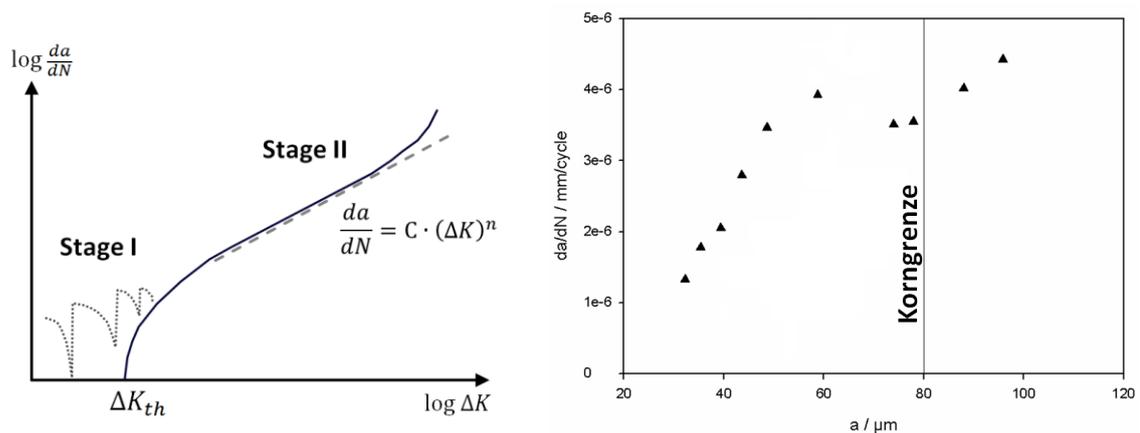


Abb. 2-45: (links) Schematische Darstellung der Rissausbreitungskurve in Abhängigkeit von  $\Delta K$  einschließlich der fluktuierenden Geschwindigkeit im Bereich Stage I.

(rechts) Verlangsamung bei Annäherung an die Korngrenze (bei  $a = 80 \mu m$ ) gemessen durch [Schäf10]<sup>60</sup>

Um die Korngrenze nun zu passieren muss der Riss zunächst so tief in seine plastische Zone hineinwachsen, bis die an der Risspitze anliegende Spannungsintensität so groß wird, dass die plastische Zone wieder beginnt weiterzuwachsen, indem der Versetzungs-Pile-Up entweder die Korngrenze durchbricht oder es zu Versetzungsnukleation jenseits der Korngrenze kommt. Dieser Prozess setzt erst bei einer kritischen Spannungsintensität ein, deren Wert ein Maß für die Barrierewirkung der Korngrenze darstellt.

<sup>60</sup> „Über die Wechselwirkung kurzer Ermüdungsrisse mit Korngrenzen – Systematische Experimente mit Focussed Ion Beam Microscope und mikrostruktureller Tomographie“ Dissertation WOLFGANG SCHÄF, Saarbrücken (2010)

**Künkler et al.**<sup>61</sup> definieren diese Größe gemäß Gleichung (32) als eine kritische Schubspannung  $\tau_{crit}$ , die erreicht werden muss, um auf einem hinter der Korngrenze liegenden Gleitsystem eine Versetzungsquelle zu aktivieren.

$$\tau_{crit} = \frac{k_{y,cyc}}{2M_S\sqrt{r}} \quad (32)$$

$k_{y,cyc}$  ist der zyklische Hall-Petch-Koeffizient,  $M_S$  der zum Gleitsystem gehörende Schmidfaktor und  $r$  der Abstand der Riss Spitze von der Korngrenze. Zwar sind diese drei Parameter geeignet, um den lokalen Spannungsverhältnissen im Ansatz Rechnung zu tragen, jedoch berücksichtigen diese Größen in keinster Weise, weder den energetischen, noch den räumlichen Charakter der Korngrenze.

So bedeutend die lokalen Spannungsverhältnisse für die Beschreibung von Rissausbreitungsmechanismen auch sind, so schwer zugänglich und berechenbar bleiben sie für eine globale und anwendungsnahe Methode, die auf der Basis möglichst weniger und einfach zu bestimmender Größen stehen soll. Und während der Einfluss der Lage der Korngrenze in Bezug auf die Ausprägung lokaler Spannungsveränderungen nur schwer abbildbar ist, so (verhältnismäßig) leicht ist hingegen die Berechnung der rein geometrischen Konfiguration. Wie sich der geometrische Lagecharakter einer Korngrenze in Zusammenhang mit den für Rissinitiierung und -ausbreitung relevanten Versetzungsmechanismen bringen lässt, wird in dem folgenden und letzten Abschnitt beleuchtet.

### 2.9.3 Berücksichtigung der Korngrenzenlage

Ein Ansatz, der neben den lokalen Schubspannungen auch eine Stück weit dem räumlichen Aspekt der Korngrenze Rechnung trägt und überdies auch eine Differenzierung verschiedener Versetzungsprozesse miteinbezieht, beinhaltet das **DDGBI**-Schema von **Shi und Zikry**<sup>62</sup>. Die Abkürzung steht für **Dislocation-Density Grain-Boundary Interaction** und bringt somit bereits zum Ausdruck, dass die Betrachtung von Versetzungsdichten im Vordergrund steht. Hierbei wird der Gleit- bzw. Riss-Transfer-Prozess wie folgt dargestellt. Eine vor der Korngrenze „ankommende“ (incoming) Versetzungsdichteverteilung, verursacht – abhängig von einem Transmissionsfaktor – eine „ausgehende“ (outgoing) Versetzungsdichteverteilung hinter der Korngrenze gemäß der folgenden Gleichung.

<sup>61</sup> „Modelling of short crack propagation – Transition from stage I to stage II“ B. KÜNKLER, O. DÜBER, P. KÖSTER, U. KRUPP, C.-P. FRITZEN, H.-J. CHRIST, *Engineering Fracture Mechanics* 75 (2008) 715-725

<sup>62</sup> „Grain-boundary interactions and orientation effects on crack behavior in polycrystalline aggregates“ J. SHI, M.A. ZIKRY, *International Journal of Solids and Structures* 46 (2009) 3914-3925

$$\rho_{\text{out}}^J = \frac{M_{IJ}(\tau_{\text{out}}^J/\tau_{\text{ref}}^J)}{\sum_{j=1}^n M_{Ij}(\tau_{\text{out}}^j/\tau_{\text{ref}}^j)} \cdot \rho_{\text{in}}^I \quad (33)$$

$\rho_{\text{in}}^I$  bezeichnet hierbei die Versetzungsdichte in dem ankommenden Gleitsystem,  $\rho_{\text{out}}^J$  jene im ausgehenden Gleitsystem. Der Faktor  $M_{IJ}$  stellt – basierend auf den geometrischen Überlegungen von Clark<sup>63</sup> – den sogenannten Transmissionsfaktor dar

$$M_{IJ} = \cos \alpha \cdot \cos \beta \quad (34)$$

welcher der geometrischen Passung der koppelnden Gleitsysteme auf der Korngrenzeebene Rechnung trägt. Der Term im Nenner von Gleichung (33) entspricht einer Normierung im Sinne einer Summierung über alle möglichen ausgehenden Gleitsysteme  $j$ .

Die beiden den Transmissionsfaktor bestimmenden geometrischen Winkel  $\alpha$  und  $\beta$  berücksichtigen entsprechend der folgenden Abbildung den Schnittwinkel  $\alpha$  zwischen den Schnittlinien der jeweiligen Gleitebenen mit der Korngrenze, sowie den Winkel  $\beta$  zwischen den beiden Gleitrichtungen.

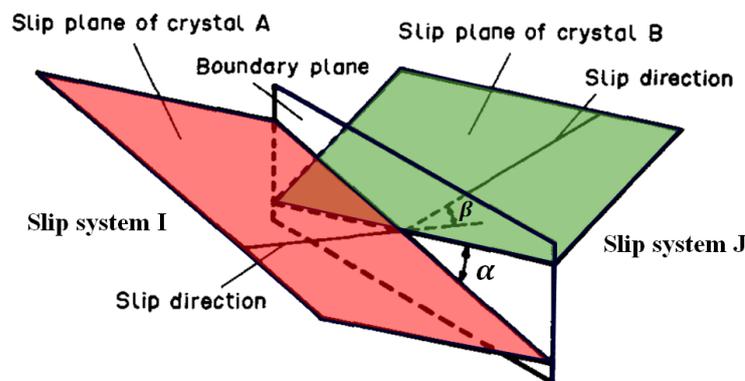


Abb. 2-46: Schematische Darstellung der geometrischen Verhältnisse zweier Gleitsysteme, die auf einer Korngrenze miteinander koppeln [Wern89]<sup>64</sup>

Während der Winkel  $\beta$  nur von den beteiligten Gleitrichtungen und somit nicht von der Korngrenzenlage abhängt, hängt der Winkel  $\alpha$  hingegen direkt von deren räumlicher Orientierung ab. Diese u.a. von Clark erdachte – und vor allem rein geometrische –

<sup>63</sup> „On the criteria for slip transmission across interfaces in polycrystals“ W.A.T. CLARK, R.H. WAGONER AND Z.Y. SHEN, *Scripta Metallurgica* Vol. 26, (1992) 203-206

<sup>64</sup> „Slip Transfer Across Grain And Phase Boundaries“ E. WERNER AND W. PRANTL, *Acta Metallurgica et Materialia* Vol 38, No. 3, (1990) 533-537

Betrachtungsweise bringt zum Ausdruck, dass etwaige Modelle zur Beschreibung von potentiellen Gleittransferprozessen mitnichten alleine durch die Missorientierungsbeziehung zweier Kristalle A und B erfasst werden können. Um den tatsächlichen Gegebenheiten Rechnung zu tragen kommt man nicht umhin auch die explizite dreidimensionale Lage der Korngrenzebene zu berücksichtigen. Hierin liegt bereits eine Erklärung, warum viele Modelle, die sich nur auf reine Missorientierungsbeziehungen von benachbarten Körnern stützen, per se in ihrer Aussagekraft beschränkt sind.

Ziel dieser Arbeit ist nun eine systematische Kalkulation von Transmissionsfaktoren in Abhängigkeit von der Korngrenzenlage durchzuführen, um nachbarschaftliche Kornbeziehungen in einem Gesamtgefüge bei teilweiser (weil nur oberflächlicher) oder näherungsweise vollständiger (dreidimensionaler) Kenntnis der jeweiligen (lokalen) Korngrenzenlage besser beschreiben zu können.

Da die Parameter, welche die Korngrenzenorientierung beschreiben in der Regel nur teil- und näherungsweise bis schwer oder gar nicht erfassbar sind fand dieser Ansatz bislang so gut wie keine Beachtung. Lediglich Werner und Prantl unternahmen – in etwa zeitlich parallel zu den Arbeiten von Shen, Wagoner, Clark, Lee, Robertson, Birnbaum – den Versuch eine von ihnen definierte „Gleitüberföhrungszahl“  $\lambda$  im Sinne eines Transmissionsfaktors zu berechnen.

Sozusagen in Erkenntnis über die Unkenntnis der tatsächlichen Korngrenzenlage wählten sie einen Ansatz, der nur eine Kornorientierung bezüglich eines festen Nachbarkorns inklusive einer fixen Korngrenze variieren ließ. Die somit von der Missorientierung abhängige Gleitüberföhrungszahl  $\lambda(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$  definierten sie sinngemäß wie folgt:

$$\lambda(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = \sum_{i=1}^{144} [\cos(\eta_i) \cdot \cos(\beta_i)] \quad (35)$$

In Analogie zum Transmissionsfaktor von Clark stellt diese Größe die Aufsummierung aller 144 möglicher Gleitsystemkopplungen dar, die sich aus der Kombination von 12x12 Gleitsystemen ergeben.  $\beta_i$  entspricht (übereinstimmend mit Clark) dem Winkel zwischen den beteiligten Gleitrichtungen.  $\eta_i$  entspricht hingegen nicht(!) dem  $\alpha$ -Winkel von Clark, also dem Winkel zwischen den Gleitebenenschnitten in der Korngrenzebene, sondern lediglich dem Winkel zwischen den koppelnden Gleitebenennormalen. D.h. die Lage der Korngrenze wird somit nicht erfasst. Trotzdem stellt der grundsätzliche Hintergedanke jener Arbeit von Werner und Prantl einen wichtigen Schritt für die Umsetzung der in dieser Arbeit entwickelten Idee dar.

### 3 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit ist Entwicklung einer quantitativen Charakterisierungsmethode, die eine Abschätzung der lokalen Schädigungstendenz eines Korngefüges auf der Mikro-Meso-Skala erlauben soll. Im Zentrum der Betrachtung steht die einzelne Korngrenze und deren Interpretation als Nachbarschaftsverhältnis zweier Kristallkörner, die auf der Korngrenze aufeinandertreffen. Da im Rahmen dieser Arbeit maßgeblich der Einfluss der räumlichen Lage der Korngrenze im Fokus steht, wurde die Interpretation der Korngrenze an ein rein geometrisches Modell gekoppelt. Vereinfacht und etwas verkürzt formuliert handelt es sich um ein Drei-Ebenen-Problem der analytischen Geometrie und die Frage: Wie schneiden sich zwei Ebenen auf einer dritten? Zwei Ebenen als die beteiligten Gleitebenen und die dritte Ebene als Korngrenze.

Etwas präziser ausgedrückt würde die Frage lauten: Wie koppeln zwei Gleitsysteme auf der dazwischen liegenden Korngrenze in Abhängigkeit von deren räumlicher Orientierung? Letztlich ist die zu beantwortende Frage jedoch, wie man ein kristallographisches Nachbarschaftsverhältnis in seiner Gesamtheit und der damit verknüpften Gleitsystem-Kompatibilität im Sinne einer geometrischen Passung beschreiben und somit quantitativ erfassbar machen kann.

Das Ziel der Definition eines sogenannten Korngrenzenwiderstandes ist Gegenstand vielfältiger Forschungsansätze. Aufgrund der enormen Komplexität der Korngrenze, in ihrer Struktur und bezüglich der tatsächlich stattfindenden Prozesse wagt der rein geometrische Ansatz, der dieser Arbeit zugrunde liegt, eine fundamentale Reduktion, indem sämtliche komplizierten und kaum zugänglichen und damit schwer berechenbaren Einflüsse vernachlässigt werden: Inkompatibilitätsspannungen und andere Spannungseinflüsse durch z.B. Versetzungen und Pile-Ups. Ebenso wenig wird dem energetischen Charakter oder der atomistischen Struktur der Korngrenze Rechnung getragen.

Andererseits erhält das im nächsten Kapitel vorgestellte Modell einen besonderen Charme durch seine Anschaulichkeit, sowohl bezüglich der Visualisierung, als auch der Berechnungsalgorithmen, die im Rahmen der *STRONG*-Methode zu quantitativen Werten führen, welche – wie der Ergebnisteil zeigen wird – im Stande sind die wesentlichen „Passungseigenschaften“ von Korngrenzen zu beschreiben.

Auf dieser Grundlage erlaubt die *STRONG*-Berechnungsmethode einen guten Kompromiss zwischen fundamentalen kristallphysikalischen bzw. mathematischen Betrachtungen und gleichzeitig einer einfach nachvollziehbaren und für die Praxis relevanten technischen Realisierbarkeit.

Grundlage für eine Analyse mittels der *STRONG*-Methode sind konventionelle metallographische Gefügecharakterisierungsmethoden<sup>65</sup>. Hierzu gehört neben den üblichen vorangehenden Präparationsschritten, wie Schleifen, Polieren und Elektropolieren, die danach erfolgende Erfassung der Gefügestrukturen mittels abbildender mikroskopischer Verfahren. [Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Präparations- und Charakterisierungsschritte, sowie jene der Probenherstellung sind im Anhang aufgeführt.]

Die folgende Abbildung zeigt die Oberfläche einer zu analysierenden Probe. Die Gefügestruktur im Stegbereich wird mittels einer EBSD-Messung erfasst. Somit liegen neben den Kristallorientierungsdaten der einzelnen Körner auch die damit in ihrer Gesamtheit verbundene Ausprägung des oberflächlichen Korngrenzennetzwerks vor.

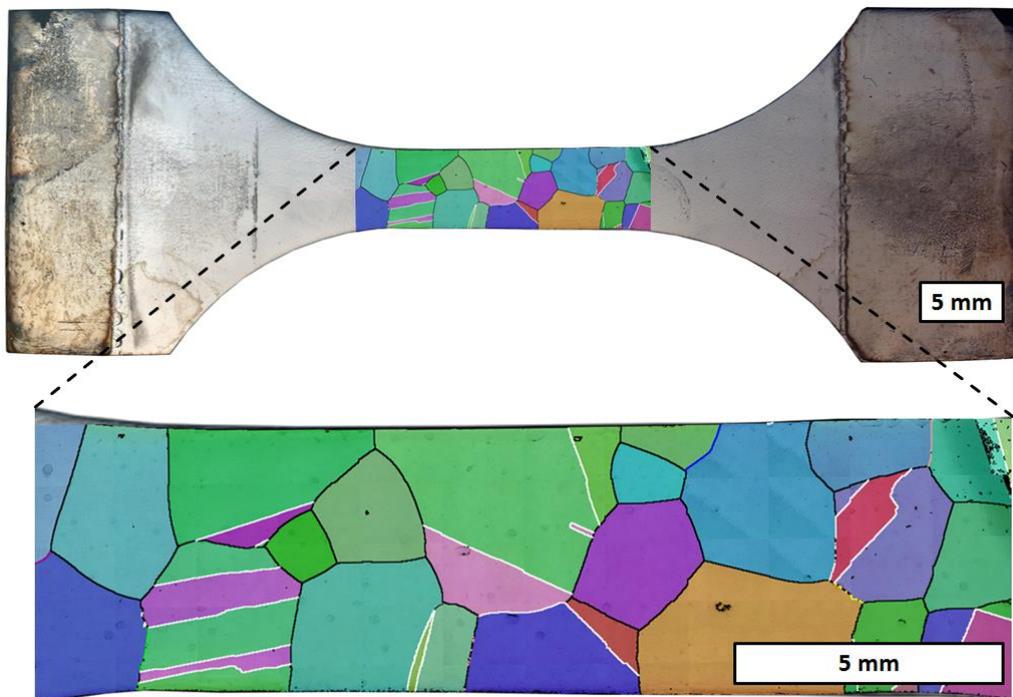


Abb. 3-1: Erfassung des Probengefüges (Korngrenzen und Kornorientierungen) mittels Lichtmikroskop und EBSD (Probe P3)

Ausschließlich auf diesen Daten basierend soll die *STRONG*-Methode zu einer korngrenzenscharfen Gesamtbewertung des Korngefüges führen. Wobei im ersten Schritt die Betrachtung einer einzelnen Korngrenze steht. Der daran anknüpfende Übergang vom Mikro- zum Meso-Gefüge erfolgt dann unter Einbeziehung aller Nachbarschaftsverhältnisse eines jeweiligen Zentralkorns, wie die folgende Abbildung veranschaulichen soll.

<sup>65</sup> „Metallographie“ HERMANN SCHUMANN, 13. Auflage, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie Stuttgart (1990)

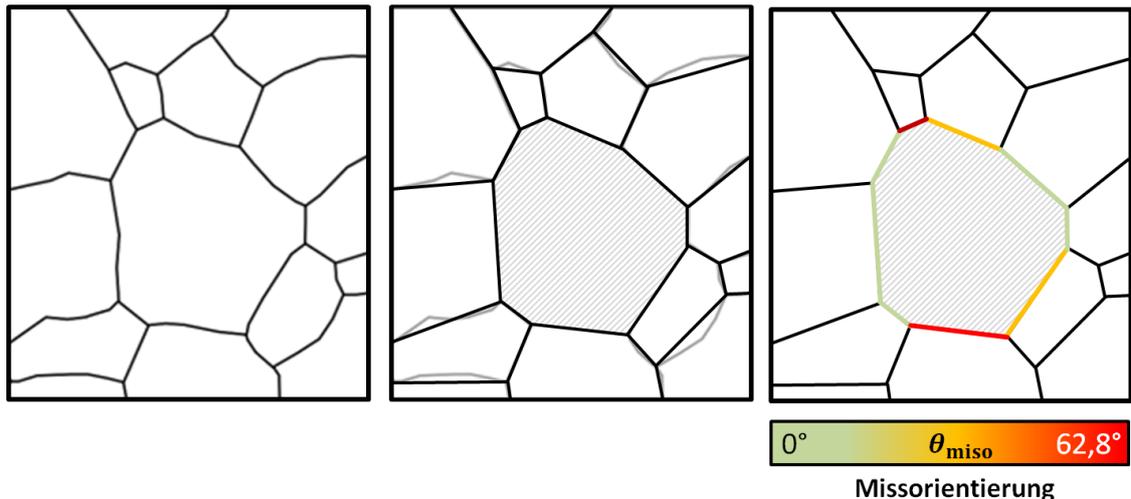


Abb. 3-2: Schematische Darstellung der Linearisierung und Klassifizierung der einzelnen Korngrenzen. (links): Korngrenzennetzwerk, (mitte): Linearisierung mittels Verbindung der Tripelpunkte, (rechts): Farbcodierung entsprechend der nachbarschaftlichen Missorientierung

Dieses – für jeden Einzelfall individuelle – zentrale Korn ist in Abb. 3-2 grau schraffiert. Die Schraffur soll überdies auch symbolisieren, dass von den 12 möglichen Gleitsystemen im Falle einer konkreten Belastung nicht alle in gleichem Maße aktiviert werden, da korrespondierend zum Schmid'schen Schubspannungsgesetz, abhängig von der Belastungsrichtung, die Scherspannungen auf den einzelnen Gleitsystemen unterschiedlich ausfallen. Die Berücksichtigung dieses Effekts im Rahmen des *STRONG*-Modells stellt nur scheinbar einen Widerspruch zu der Maßgabe dar, auf jedwede Spannungseinflüsse zu verzichten. Denn letztlich wird nur der geometrische Charakter des Schubspannungsgesetzes mitberücksichtigt, also die Lage der Gleitsysteme zu einer äußeren Zugachse. Dennoch soll am Ende dieser Arbeit eine möglichst allgemeine Beurteilung der einzelnen Nachbarschaftsverhältnisse stehen, also unabhängig von einzelnen Gleitsystemkopplungen, sondern vielmehr in Gesamtschau, also einer Art gewichteter Mittelung über alle denkbaren Kopplungen. Bevor dieser Schritt jedoch gegangen werden kann, muss zunächst ein tiefgreifendes Verständnis für die Mechanismen des konkreten Einzelfalles sichergestellt werden. Anhand der folgenden Darstellung lassen sich beispielhaft und rein schematisch insgesamt vier Einzelbetrachtungen erläutern, von denen in zwei Fällen deutlich wird, dass der reine Fehlorientierungscharakter einer Korngrenze eben nicht in allen Fällen imstande ist, das Auftreten von Gleittransmission bzw. dem Blockieren von Gleitung korrekt zu beschreiben, wie der linke Teil der Abb. 3-3 zeigt. Gelänge hingegen eine Bewertung der Korngrenzen hinsichtlich deren geometrischer Passung, also sozusagen der Fehlpassung, dann sollte, wie im rechten Teil dargestellt, eine korrekte Vorhersage der auftretenden Transmissions- respektive Blockierungsprozesse möglich sein.

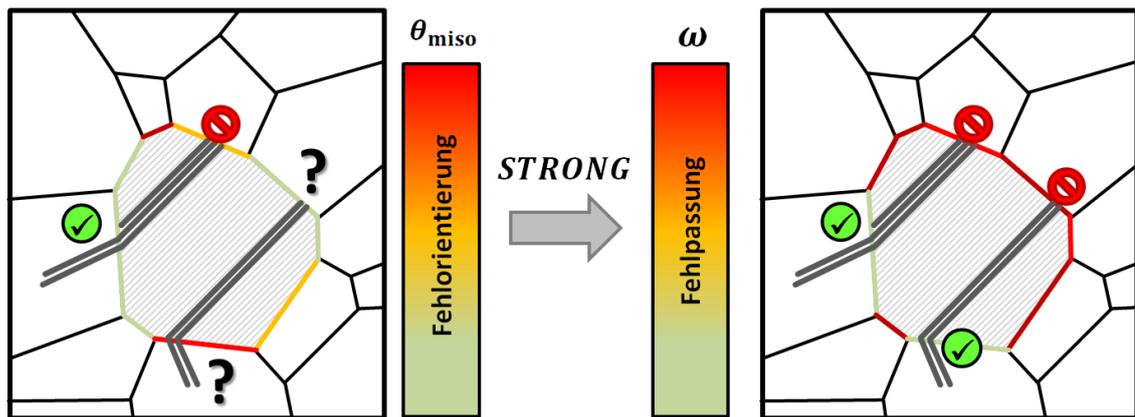


Abb. 3-3: Beschreibung des Korngrenzencharakters durch dessen Fehlpassung anstelle der konventionellen Fehlorientierung

Dieser Fehlpassungscharakter  $\omega$  soll zusammen mit einer zur Fehlorientierung analogen Farbcodierung (kleine Werte grün, große Werte rot) eine intuitive Beurteilung jedes einzelnen, durch die Korngrenze repräsentierten, Nachbarschaftsverhältnisses erlauben.

Die Gleitlinien im oberen Bereich des im Zentrum der Abb. 3-3 stehenden Korns zeigen ein konventionelles Verhalten, indem sie von der Großwinkelkorngrenze (orange, oben) blockiert werden, während sie die Kleinwinkelkorngrenze (hellgrün, links) passieren können. Das andere Gleitlinienpaar hingegen verhält sich genau umgekehrt. Es passiert eine (rote) Großwinkelkorngrenze (unten) trotz enormer Fehlorientierung, bleibt jedoch (oben rechts) vor einer Korngrenze (grün) stehen, die aufgrund ihrer Fehlorientierung einen Transfer eigentlich erlauben sollte. Erst der Wechsel zu der beschriebenen Darstellung im Sinne der Fehlpassung (rechtes Bild) löst diese Widersprüchlichkeit theoretisch auf und erklärt die gezeigten schematischen Prozesse korrekt. Dass sich dieses Verhalten (insb. die Gleitung durch Großwinkelkorngrenzen) auch tatsächlich im Experiment wieder findet, zeigt die folgende Abb. 3-4.

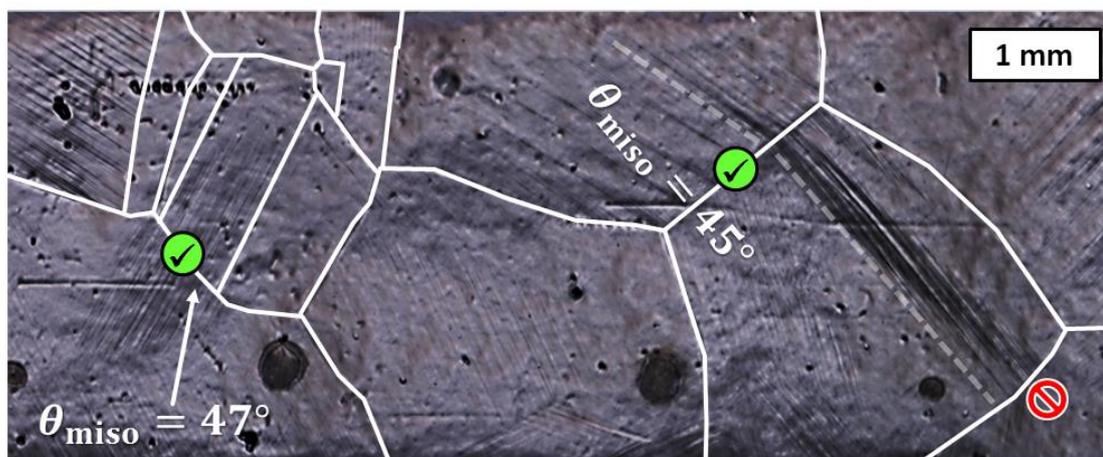


Abb. 3-4: Auftreten von Gleitlinientransmission durch Großwinkelkorngrenzen (P2)

Da sich dieses Verhalten nicht mit dem klassischen Fehlorientierungsbegriff erklären lässt wird somit eine andere Größe erforderlich, die in der Lage sein soll, dieses Phänomen beschreiben zu können.

Deshalb ist es der Hauptgegenstand dieser Arbeit mittels der *STRONG*-Analyse eine Gefüge- bzw. Korngrenzencharakterisierung zu etablieren, welche möglichen kornübergreifenden Kopplungsprozessen besser Rechnung tragen soll, als dies bisherige Modelle tun. Wenngleich eine solche Quantifizierung mitnichten in einer einzelnen schlichte Zahl Ausdruck finden kann, soll zumindest im Endergebnis – unter Berücksichtigung erforderlicher Annahmen – ein farbcodiertes Korngrenzennetz stehen, welches dem Betrachter intuitiv vermitteln soll, welche Korngrenzen tendenziell eine Transmission begünstigen (grün) oder eher verhindern (rot), wie dies in Abb. 3-3 (rechts) gezeigt ist.

Eine solche farbliche – also letztlich doch skalare – Quantifizierung erfordert natürlich eine nachträgliche maximale Reduktion der hinter der *STRONG*-Methode stehenden Berechnungen. Dieser Weg, vom EBSD-Scan, der die Inputdaten liefert, bis hin zu einer automatisierten Bewertung aller Korngrenzen hinsichtlich ihres Widerstandes, ist der mit dieser Arbeit verbundene Fortschritt und wird in dem folgenden Kapitel ausführlich dargestellt.

## 4 Die STRONG-Methode

Der Terminus „Methode“ soll zum Ausdruck bringen, dass sich die Analyse eines Gleittransferprozesses nur schwerlich auf die Interpretation beispielsweise einer einzigen Gleichung reduzieren lässt. Wie im zweiten Kapitel aufgeführt, spielen mehrere Aspekte stets gleichzeitig und darüber hinaus in gegenseitiger Abhängigkeit eine Rolle. Um dieser Komplexität Rechnung zu tragen, besteht die Notwendigkeit einer systematischen Verknüpfung von Einzelbetrachtungen. Nicht zuletzt wegen des dreidimensionalen Charakters der geometrischen Gesamtkonstellation, wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit zusätzlich eine geeignete 3D-Visualisierungsmethode entwickelt. Diese hat neben dem Zweck der Anschauung auch maßgeblich zur permanenten Plausibilisierung des quantitativen Teils der Methode beigetragen. Die Grundaufgabe von **STRONG** besteht darin, ausgehend von 8 Parametern, welche die Orientierungsbeziehung eines Nachbarschaftsverhältnisses definieren (und der Zugachse), eine Aussage zu treffen, wie gut die Passung möglicher Gleitsystemkopplungen auf der Korngrenzenebene ist. Mittels dieser Passung kann dann eine Größe eingeführt werden, die den Widerstand einer Korngrenze gegenüber dem Transfer von Gleitung in einem geometrischen Sinne quantifiziert.

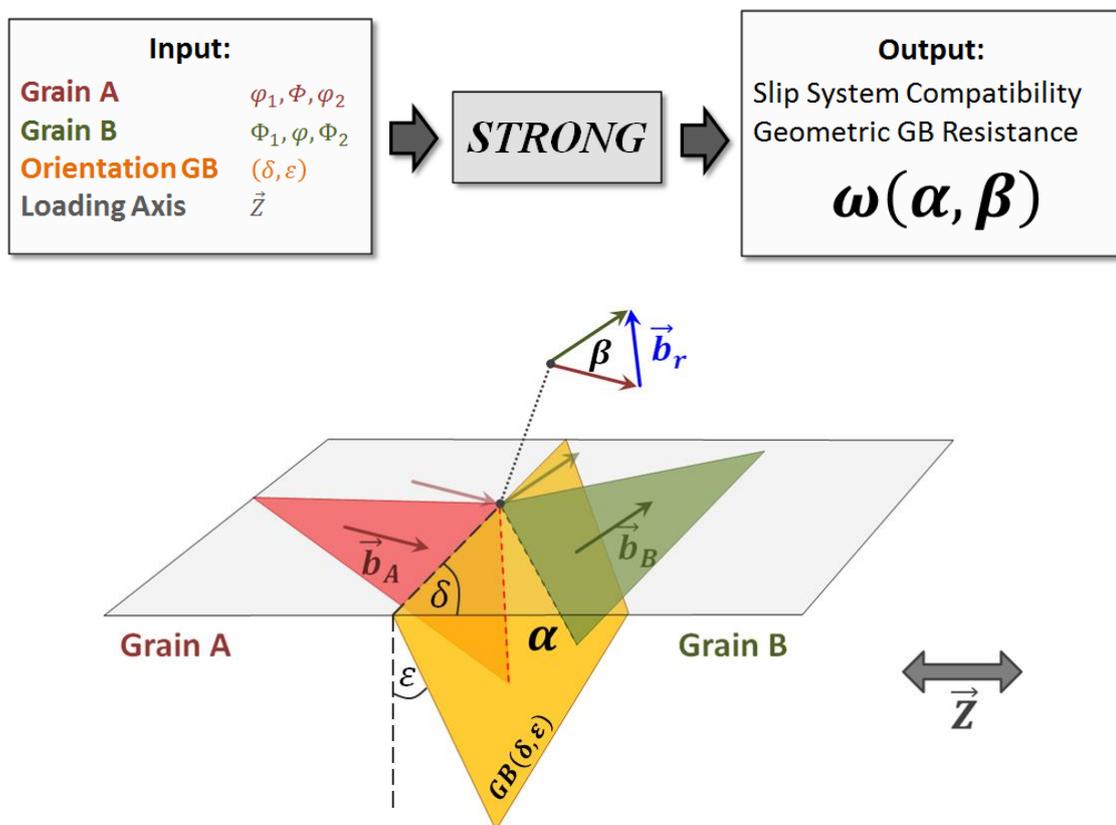


Abb. 4-1: Schematische Darstellung der STRONG-Methode, sowie der 3D-Konfiguration

Die Schemazeichnung in Abb. 4-1 zeigt die dreidimensionale Konfiguration zweier Gleitebenen (rot und grün), die beide die Korngrenze schneiden. Die somit in der Korngrenze liegenden Schnittlinien (rot bzw. grün gestrichelt) schließen dabei einen Winkel  $\alpha$  ein. Dieser Schnittwinkel variiert stark mit der Lage der Korngrenze, wie die folgende Abbildung verdeutlichen soll, bei der lediglich der Tiefeneneigungswinkel  $\varepsilon$  der Korngrenze, bei sonst identischen Parametern, von  $120^\circ$  auf  $60^\circ$  verändert wird.

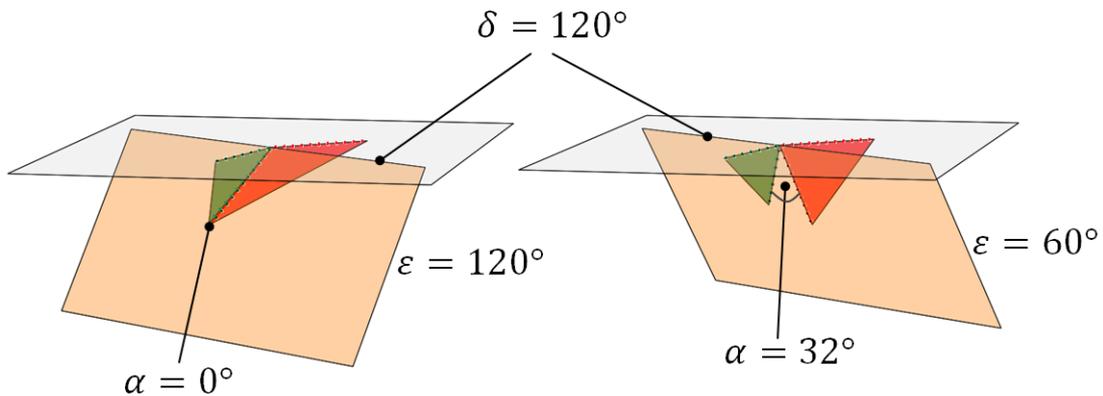


Abb. 4-2: Abhängigkeit der  $\alpha$ -Passung von der Korngrenzenlage

Das heißt  $\alpha$  selbst ist wiederum eine Funktion  $\alpha(\delta, \varepsilon)$  der beiden die Orientierung der Korngrenze beschreibenden Parameter  $\delta$  und  $\varepsilon$ , welche gemäß der folgenden Gleichung eindeutig den Normalenvektor der Korngrenze beschreiben.

$$\vec{n}(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \sin \delta \cdot \sin \varepsilon \\ -\cos \delta \cdot \sin \varepsilon \\ \cos \varepsilon \end{pmatrix} \quad (36)$$

Da alle möglichen Orientierungen der Korngrenze erlaubt sein sollen, dürfen die Winkel  $\delta$  und  $\varepsilon$ , eingedenk der allgemeinen  $180^\circ$ -Symmetrie einer Ebene, alle Werte zwischen  $0^\circ$  und  $180^\circ$  einnehmen. Die im Grundlagenteil festgelegte Definition von  $\delta$  und  $\varepsilon$  bezüglich des Bezugssystems hat zur Konsequenz, dass das Wertepaar  $(\delta = 0^\circ, \varepsilon = 0^\circ)$  zu dem Fall einer uneigentlichen Korngrenze führt, da diese Ebene exakt der Probenoberfläche entspricht. In diesem Fall liefert die Gleichung (36) eine Normale in z-Richtung.

$$\vec{n}(0^\circ, 0^\circ) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (37)$$

Bei Kenntnis der Korngrenzenlage und somit von  $\delta$  und  $\varepsilon$  ist es im nächsten Schritt möglich die Schnittlinien zwischen den Gleitebenen und der Korngrenze zu berechnen. Betrachten wir die Gleitebene von Korn A mit der Normalen  $\vec{E}_A$ , sowie die Gleitebene  $\vec{E}_B$  aus Korn B, so lauten die korrespondierenden Vektoren der beiden Schnittgeraden:

$$\vec{s}_A = \vec{E}_A \times \vec{n}(\delta, \varepsilon) \quad \text{bzw.} \quad \vec{s}_B = \vec{E}_B \times \vec{n}(\delta, \varepsilon) \quad (38)$$

Der gesuchte Schnittwinkel  $\alpha$  ist dann gerade der Winkel zwischen den in Gleichung (38) berechneten Schnittgeraden und definiert sich somit wie folgt:

$$\alpha = \arccos \left( \frac{\vec{s}_A \cdot \vec{s}_B}{|\vec{s}_A| \cdot |\vec{s}_B|} \right) \quad (39)$$

Unter Berücksichtigung der Normierungseigenschaften der beteiligten Vektoren, wobei der Normalenvektor  $\vec{n}(\delta, \varepsilon)$  definitionsbedingt stets auf eins normiert bleibt und die  $\{111\}$ -Gleitebenen durch  $\sqrt{3}$  normiert werden, kann die Größe des Schnittwinkels in Abhängigkeit von der Korngrenzenlage wie folgt berechnet werden:

$$\alpha(\delta, \varepsilon) = \arccos \left[ \frac{(\vec{E}_A \times \vec{n}(\delta, \varepsilon)) \cdot (\vec{E}_B \times \vec{n}(\delta, \varepsilon))}{\sqrt{3} \cdot \sqrt{3}} \right] \quad (40)$$

Anders als  $\alpha(\delta, \varepsilon)$  hängt der Winkel  $\beta$  ausdrücklich nicht(!) von der Korngrenze ab, da  $\beta$  den Winkel zwischen den gleitrichtungsdefinierenden Burgersvektoren erfasst. Diese Vektoren sind jeweils fest verbunden mit ihrer Kristallorientierung und somit gänzlich unabhängig von der Orientierung der Korngrenze (vgl. Abb. 4-1).

Entsprechend des Normierungsfaktors  $\sqrt{2}$  der beteiligten  $\langle 110 \rangle$ -Gleitrichtungen, berechnet sich  $\beta$  wie folgt:

$$\beta = \arccos \left( \frac{\vec{b}_A \cdot \vec{b}_B}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{2}} \right) \quad (41)$$

An dieser Stelle sei auch die später noch relevante Definition des sogenannten Restburgersvektors  $\vec{b}_r$  angegeben, dessen Betrag  $|\vec{b}_r|$  entsprechend dem Kosinussatz mit dem Winkel  $\beta$  korreliert.

$$\vec{b}_r = \vec{b}_A - \vec{b}_B \quad (42)$$

Nach dem nun  $\alpha(\delta, \varepsilon)$  und  $\beta$  definiert sind und durch die Angabe der benachbarten Kristallorientierungsdaten, also den Eulerwinkeln von Korn A ( $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ ), sowie dem Eulertripel von Korn B ( $\Phi_1, \varphi, \Phi_2$ ), die tatsächlichen Gleitebenen und -richtungen gemäß der folgenden Gleichungen konkret berechenbar sind,

$$\vec{b}_A = \mathbf{R}_A(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_B = \mathbf{R}_B(\Phi_1, \varphi, \Phi_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$\vec{E}_A = \mathbf{R}_A(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{E}_B = \mathbf{R}_B(\Phi_1, \varphi, \Phi_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (44)$$

lässt sich bei ebenfalls bekanntem  $\delta$  und  $\varepsilon$  der von Clark definierte Transmissionsfaktor wie folgt berechnen:

$$t(\alpha, \beta) = \cos \alpha(\delta, \varepsilon) \cdot \cos \beta \quad (45)$$

Da  $\alpha$  und  $\beta$  zwar anschauliche, aber letztlich nur Hilfsgrößen sind, ist eine Darstellung in Abhängigkeit von  $\delta$  und  $\varepsilon$  sinnvoller:

$$t(\delta, \varepsilon) = \cos \alpha(\delta, \varepsilon) \cdot \cos \beta \quad (46)$$

Gemäß der in diesem Abschnitt angestellten Herleitung dieses Transmissionsfaktors gilt es jedoch zu berücksichtigen, dass sich der Ansatz zunächst lediglich auf die Betrachtung nur einer einzigen Kopplung eines Gleitsystems aus Korn A mit ebenfalls nur einem Gleitsystem aus Korn B beschränkt. Wie dieses Konzept nun auf die Berücksichtigung aller in Frage kommenden Gleitsystemkopplungen erweitert werden kann und dies vor allem auch für eine variable Korngrenzenorientierung, soll in dem nächsten Abschnitt beleuchtet werden.

## 4.1 Erfassung der Gleitsystemkopplungen

Der im vorhergehenden Abschnitt hergeleitete Transmissionsfaktor, ist, wie die Begrifflichkeit Faktor impliziert, lediglich eine skalare Größe. Der so definierte Wert kann deshalb stets nur eine einzige Gleitsystemkopplung bei zugleich nur einer ganz bestimmten Korngrenzenorientierung repräsentieren.

Trotzdem stellt dieses Konzept den grundlegenden Ansatz für alle weiterführenden Betrachtungen dar und bildet auch das Kernelement, sowohl für die visuelle, als auch für die analytische Modellierung. Die dreidimensionale Visualisierung eines Nachbarschaftsverhältnisses (vgl. Abb. 4-3 rechts unten), als Setting zweier Körner und der Korngrenze, wurde durch eine selbstprogrammierte Routine in dem Computeralgebrasystem *Maple* bewerkstelligt.

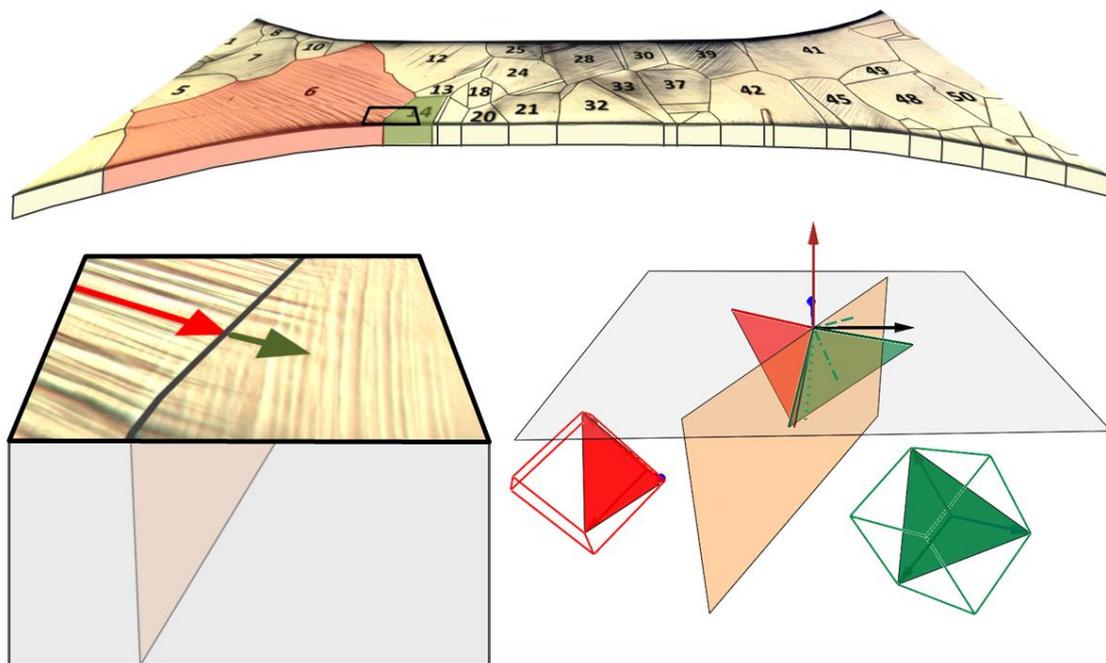


Abb. 4-3: Vollständige Erfassung und Abbildung der dreidimensionalen geometrischen Gesamtkonfiguration

Auch wenn diese Routine notwendigerweise alle für die Beschreibung eines beliebigen Korngrenzen-Szenarios nötigen Inputparameter enthält: Eulerwinkel Korn A:  $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ , Eulerwinkel Korn B:  $\Phi_1, \varphi, \Phi_2$ , sowie die Korngrenzenorientierung, wurden sämtliche Berechnungsprozesse im Sinne einer systematischen und quantitativen Auswertung inklusive deren Darstellung mittels *Microsoft Excel* durchgeführt. Die Komplexität des Gesamtproblems liegt u.a. darin, dass die Betrachtung nur einer einzigen Gleitsystemkopplung zu kurz greift. Ist der im vorangegangenen Abschnitt hergeleitete Transmissi-

onsfaktor zwar im Stande den Transmissionscharakter einer einzelnen Kopplung zu repräsentieren, müssen in der Gesamtschau jedoch alle denkbar möglichen 12x12 Gleitsystemkombinationen berücksichtigt werden. Vor dem Übergang zu einer Matrixschreibweise, die alle 144 Kopplungen zu beschreiben in der Lage ist, sollten jedoch noch die folgenden Überlegungen vorangestellt werden.

Da der von Clark definierte Transmissionsfaktor das Produkt zweier Cosinusterme darstellt und für die Winkel  $\alpha$  und  $\beta$  grundsätzlich keine Beschränkungen vorliegen lässt sich der durch  $t$  definierte Transmissionscharakter durch einen 0...1-Formalismus interpretieren. Koppeln zwei Gleitsysteme so, dass ihre Richtungsvektoren in die gleiche Richtung zeigen ( $\beta = 0^\circ$ ) und die Schnitte der beteiligten Gleitebenen auf der Korngrenze exakt zusammenfallen ( $\alpha = 0^\circ$ ), dann werden beide Cosinusterme zu 1, somit auch deren Produkt. Dieser Fall der maximalen Transmission entspricht dem unechten Nachbarschaftsszenario identischer Körner. Im Allgemeinen hingegen sind  $\alpha$  und  $\beta$  von Null verschieden und führen damit zu Transmissionswerten kleiner 1. Jedoch festzustellen ist, dass bereits wenn nur einer der beiden Winkel den Wert  $90^\circ$  annimmt, dies zur Folge hat, dass  $t$  insgesamt zu Null wird.

$$t = \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) = 1 \dots 0 \quad (47)$$

Da Korngrenzen gemeinläufig eher im Sinne ihrer Blockierungswirkung als durch ihren Transmissionscharakter interpretiert werden, scheint eine Invertierung des dargestellten Formalismus sinnvoll. Dieser Schritt wird realisiert durch die Definition eines Widerstandsfaktors  $\omega$ , der sozusagen als geometrischer Korngrenzenwiderstand interpretiert werden kann.

$$\omega = 1 - t = 1 - \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) = 0 \dots 1 \quad (48)$$

Nach diesem Wechsel der Logik – vom Transmissions- zum Widerstandscharakter – folgt nun der Schritt zur Betrachtung der Gesamtheit aller Gleitsystemkopplungen, welche Ausdruck in der folgenden Matrixschreibweise findet:

$$\boldsymbol{\omega} = \omega_{i,j} = 1 - t_{i,j} = 1 - \cos \alpha_{i,j} \cdot \cos \beta_{i,j} \quad (49)$$

Wobei der Index  $i = 1 \dots 12$  das jeweilige Gleitsystem von Korn A adressiert und analog der Index  $j = 1 \dots 12$  das betrachtete Gleitsystem in Korn B.

Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die somit aus 144 Einträge bestehende Matrix in der folgend dargestellten Form lediglich für nur genau eine Korngrenzenorientierung gilt, da auch die  $\alpha_{i,j}$  weiterhin von  $\delta$  und  $\varepsilon$  abhängen.

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0,16 & 0,98 & 0,14 & 0,16 & 0,30 & 0,86 & 0,94 & 0,99 & 0,94 & 0,95 & 0,78 & 0,73 \\ 0,12 & 0,19 & 0,93 & 0,12 & 0,83 & 0,28 & 0,96 & 0,66 & 0,70 & 0,97 & 0,95 & 0,98 \\ 0,96 & 0,17 & 0,21 & 0,96 & 0,46 & 0,42 & 0,90 & 0,65 & 0,76 & 0,92 & 0,83 & 0,75 \\ 0,94 & 1,00 & 0,94 & 0,84 & 0,86 & 0,97 & 0,85 & 0,98 & 0,87 & 0,86 & 0,36 & 0,22 \\ 0,98 & 1,00 & 0,98 & 0,94 & 0,81 & 0,87 & 0,38 & 0,98 & 0,36 & 0,40 & 0,12 & 0,72 \\ 0,96 & 1,00 & 0,96 & 0,89 & 0,95 & 0,84 & 0,23 & 1,00 & 0,23 & 0,26 & 0,77 & 0,50 \\ 0,73 & 0,34 & 0,61 & 0,71 & 0,63 & 0,92 & 0,24 & 0,32 & 0,92 & 0,77 & 0,89 & 0,88 \\ 0,28 & 0,34 & 0,94 & 0,22 & 0,85 & 0,37 & 0,92 & 0,31 & 0,39 & 0,98 & 0,96 & 0,98 \\ 0,55 & 1,00 & 0,55 & 0,51 & 0,77 & 0,28 & 0,32 & 1,00 & 0,31 & 0,80 & 0,93 & 0,86 \\ 0,89 & 0,73 & 0,84 & 0,93 & 0,91 & 0,98 & 0,32 & 0,39 & 0,93 & 0,10 & 0,57 & 0,52 \\ 0,90 & 0,99 & 0,90 & 0,94 & 0,80 & 0,86 & 0,51 & 0,99 & 0,49 & 0,34 & 0,03 & 0,69 \\ 0,99 & 0,72 & 0,74 & 0,99 & 0,89 & 0,88 & 0,81 & 0,38 & 0,57 & 0,75 & 0,46 & 0,21 \end{pmatrix} \tag{50}$$

In Anlehnung an ein reales Beispiel verdeutlicht die Matrix in Gleichung (50), dass in Anbetracht der enormen Menge an Einzeleinträgen (144 Stück) eine intuitive Interpretation dieser Matrix nur schwer möglich ist.

Da jeder der Einträge einen Wert zwischen 0 und 1 hat kann eine schlichte Farbcodierung mittels eines Farbverlaufs von 0 zu 1 einen ersten Schritt in Richtung einer besseren visuellen Erfassbarkeit leisten, wie die folgende Abbildung verdeutlichen soll.

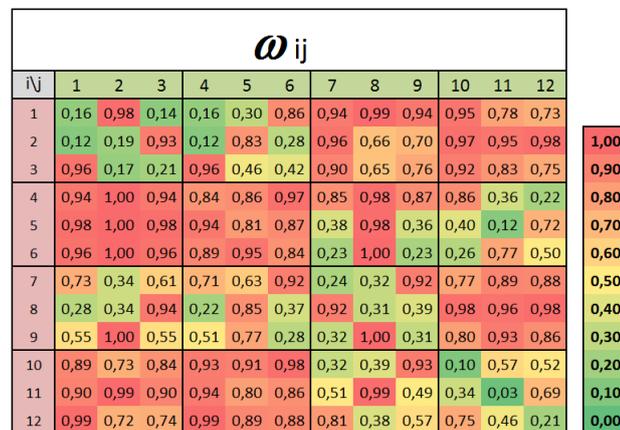


Abb. 4-4: Verbesserte Darstellung der Gleitsystemkopplungsmatrix mittels Farbcodierung

Diese Ansicht erlaubt dem Betrachter einen intuitiveren Eindruck was die Verteilung und die jeweilige Größe der einzelnen Widerstandsfaktoren angeht. Hohe Widerstandswert erscheinen rötlich, niedrige grünlich. Der hier gewählte, zwischen 0 und 1 kontinuierlich verlaufende Farbcode ist in dieser Form jedoch noch nicht in der Lage eine anwendungsbezogene Beurteilung bezüglich des geometrischen Korngrenzenwiderstandes zu leisten. Hierzu ist eine Eingrenzung des Wertespektrums vonnöten, da Gleittransmis-

sionsprozesse an Korngrenzen erfahrungsgemäß mitnichten kontinuierlich zwischen „0 und 1“ vonstatten gehen. Denn grundsätzlich ist die Korngrenze eine Barriere und der im Rahmen dieser Arbeit angenommene Prozess der geometrischen Transmission wird erst möglich, bei verhältnismäßig „geringen“ Werten für  $\alpha$  und  $\beta$ . Die Frage, wo ein solcher Grenzwinkel festzusetzen ist, soll ebenfalls Gegenstand dieser Arbeit sein. Deshalb wird an dieser Stelle zunächst ein Grenzwert von  $15^\circ$  angesetzt. Zum einen in Analogie zu dem typischen, in der Literatur gängigen Grenzwert zwischen Klein- und Großwinkelkorngrenze, zum anderen weil auch Werner und Prantl in Anlehnung an die Arbeiten von **Davis et al.**<sup>66</sup> diesen Vorschlag gemacht haben. Diese haben an Aluminium-Bikristallen die Kontinuität von Gleitbändern ebenfalls in Abhängigkeit von der Divergenz der Schnittlinien der beteiligten Gleitebenen studiert.

Wegen der enormen Bedeutung der Einführung eines solchen  $15^\circ$ -Grenzwertkonzeptes, sowohl für die Visualisierung als auch die Interpretation der folgenden Ergebnisse und deren Darstellung im Rahmen der Arbeit, sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass es keinerlei direkten Zusammenhang zwischen den Winkeln  $\alpha$  und  $\beta$  UND dem Winkel der Missorientierung zweier benachbarter Kristallite gibt.

Ebenso wichtig ist das Verständnis, wie die Winkel  $\alpha$  und  $\beta$  bezüglich des Grenzwertes zu interpretieren sind. Im Vordergrund steht hierbei die Betrachtung des Transmissions- bzw. (umgekehrt) des geometrischen Widerstandsfaktors, also  $t(\alpha, \beta)$  bzw.  $\omega(\alpha, \beta)$ . Korrespondierend zum  $15^\circ$ -Grenzwert resultieren daraus die beiden Grenzwerte:

$$t = \cos(15^\circ) \cdot \cos(15^\circ) = 0,933 \quad (51)$$

bzw.

$$\omega = 1 - 0,933 = 0,067 \quad (52)$$

Im Sinne der Barriere-, also Widerstandswirkung der Korngrenze definiert dieser Wert 0,067 gerade jenen Grenzwiderstand, der eine qualitative Abgrenzung zwischen der Neigung zu Transmission (Werte zwischen 0 und 0,067) und der Tendenz zur Blockade (Werte größer 0,067 bis maximal 1) leisten soll. Es handelt sich genau genommen um eine zunächst willkürliche Festsetzung<sup>67</sup>, deren Qualität im Rahmen dieser Arbeit zu prüfen ist.

<sup>66</sup> „Slip band continuity across grain boundaries in aluminum“ K.G. DAVIS, E. TEGHTSOONIAN, A. LU, *Acta Metallurgica Vol. 14, Issue 12 (1966)* 1677-1684

<sup>67</sup> Der aus  $\alpha = \beta = 15^\circ$  resultierende Grenzwert  $\omega = 0,067$  soll letztlich auch solche Kombinationen, wie z.B.  $\alpha = 5^\circ$  und  $\beta = 20^\circ$  erlauben, bei denen zwar ein Winkel größer  $15^\circ$  ist,  $\omega$  jedoch immer noch kleiner als 0,067

### 4.2 Darstellung der Kopplungsmatrix

Wendet man nun diese 15°-Schranke bereits bei der (farbcodierten) Darstellung der Schnittwinkel  $\alpha_{i,j}$ , sowie den  $\beta_{i,j}$  an, erhält man einen detaillierten und nach Gleitebenen, sowie Gleitrichtungen getrennten Eindruck, wie sich die daraus resultierende Gleit-systemkopplung zusammensetzt.

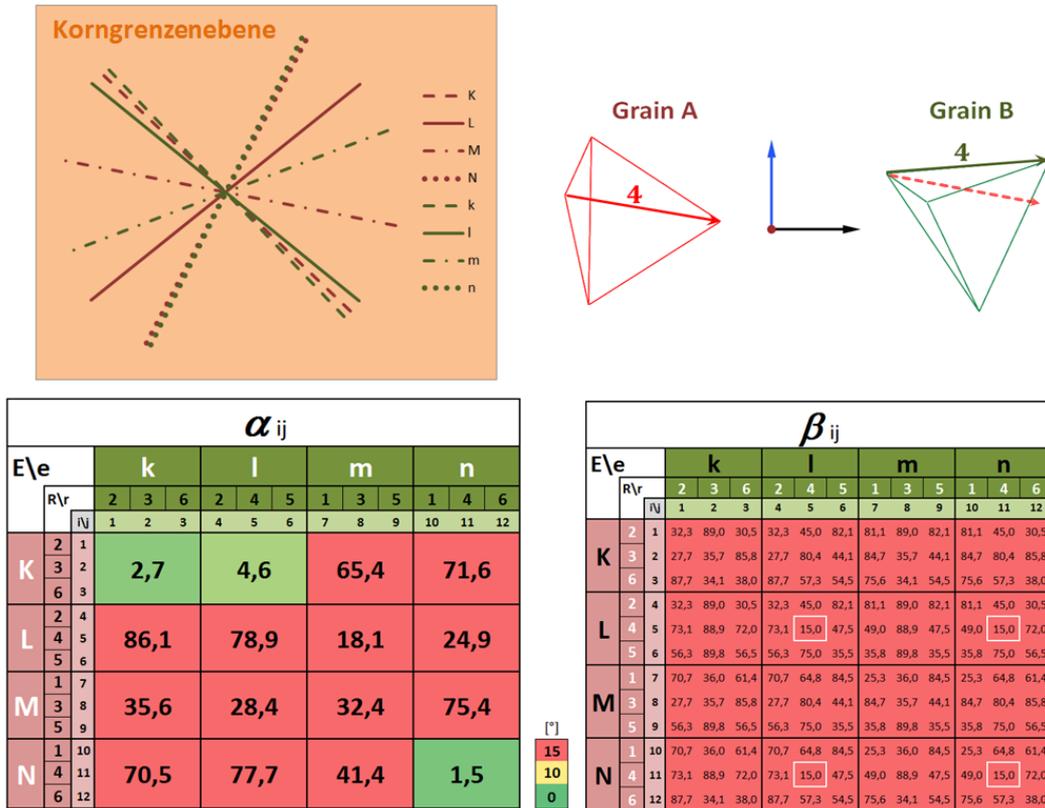


Abb. 4-5: Visualisierung und quantitative Erfassung der Gleitebenenschnitte und der Gleitrichtungskopplungen. Großbuchstaben identifizieren die Ebenen aus Korn A (rot), die Kleinbuchstaben aus Korn B (grün). Die mit Groß-R bzw. klein-r adressierten Felder beziehen sich auf die korrespondierenden Gleitrichtungskopplungen. In Kombination von Gleitebenen E/e und Gleitrichtungen R/r werden mittels den Indizes i und j die 144 möglichen Gleit-systemkopplungen adressiert.

Abb. 4-5 (links oben) zeigt in frontaler Draufsicht die für dieses Beispiel gewählte Korngrenzebene, einschließlich der je Korn vier Schnittlinien, wie sie durch den Schnitt der Gleitebenen mit der Korngrenze erzeugt werden. Die auf diese Weise 4x4, also 16 möglichen Gleitebenenkombinationen und die daraus resultierenden Schnittwinkel sind in der darunter stehenden Tabelle aufgelistet. Entsprechend der auf 15° begrenzten Farbcodierung sind alle größeren Winkel einheitlich rot. D.h. der in dem Bereich von 0° bis 15° kontinuierliche grün-gelb-rot Verlauf beschränkt sich lediglich auf dieses Spektrum. Der kleinste Schnittwinkel bei diesem Beispiel, mit einem  $\alpha$  von 1,5° gehört zu der Ebenenkopplung N-n.

Die rechte Hälfte derselben Abbildung repräsentiert die Kombinationen der verschiedenen Gleitrichtungen. Die zu jedem der beiden Tetraeder gehörenden sechs unabhängigen Gleitrichtungen führen zu insgesamt 6x6, also 36 möglichen Richtungskopplungen. Da Gleitrichtungen und -ebenen jedoch nicht unabhängig voneinander sind ist jeder Wert sozusagen vierfach „entartet“, sprich, angeordnet in der 12x12 Gleitsystemkopplungsmatrix tritt jeder Wert viermal auf. In dieser rechts unten stehenden Matrix fällt sofort ins Auge, dass alle Werte im roten Bereich, also oberhalb des Grenzwertes von  $15^\circ$  liegen. Um dennoch die beste Gleitrichtungspassung sichtbar zu machen, die für die Kopplung R4-r4 den minimalen Wert von gerade eben diesen  $15^\circ$  einnimmt, sind diese vier Einträge weiß umrahmt.

Da jedoch Gleitebenen und Gleitrichtungen nicht unabhängig voneinander stehen, sondern deren jeweilige Kombination zu den jeweils 12 möglichen Gleitsystemen im Zentrum der eigentlichen Betrachtung steht, zeigt die folgende Abbildung erneut die bereits bekannte Widerstandsmatrix, diesmal jedoch mit der durch den Grenzwert definierten Farbcodierung.

$\omega_{ij}$												
$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	0,16	0,98	0,14	0,16	0,30	0,86	0,94	0,99	0,94	0,95	0,78	0,73
2	0,12	0,19	0,93	0,12	0,83	0,28	0,96	0,66	0,70	0,97	0,95	0,98
3	0,96	0,17	0,21	0,96	0,46	0,42	0,90	0,65	0,76	0,92	0,83	0,75
4	0,94	1,00	0,94	0,84	0,86	0,97	0,85	0,98	0,87	0,86	0,36	0,22
5	0,98	1,00	0,98	0,94	0,81	0,87	0,38	0,98	0,36	0,40	0,12	0,72
6	0,96	1,00	0,96	0,89	0,95	0,84	0,23	1,00	0,23	0,26	0,77	0,50
7	0,73	0,34	0,61	0,71	0,63	0,92	0,24	0,32	0,92	0,77	0,89	0,88
8	0,28	0,34	0,94	0,22	0,85	0,37	0,92	0,31	0,39	0,98	0,96	0,98
9	0,55	1,00	0,55	0,51	0,77	0,28	0,32	1,00	0,31	0,80	0,93	0,86
10	0,89	0,73	0,84	0,93	0,91	0,98	0,32	0,39	0,93	0,10	0,57	0,52
11	0,90	0,99	0,90	0,94	0,80	0,86	0,51	0,99	0,49	0,34	0,03	0,69
12	0,99	0,72	0,74	0,99	0,89	0,88	0,81	0,38	0,57	0,75	0,46	0,21

$\omega$
0,067
0,059
0,051
0,043
0,036
0,030
0,024
0,019
0,015
0,011
0,008
0,005
0,003
0,001
0,000
0,000

Abb. 4-6: Farbcodierung entsprechend des  $\omega$ -Grenzwertes von 0,067 (vor dem Hintergrund des eingeführten Grenzwertes für  $\alpha = \beta = 15^\circ$ ) mit dem Ziel den Blick auf die tatsächlich für eine Transmission in Frage kommenden Gleitsystemkopplungen zu lenken (hier:  $i = 11, j = 11$ )

In dieser Darstellungsweise lässt sich nun ablesen, ob und wenn ja, welche der 144 möglichen Gleitsystemkopplungen aufgrund ihrer geometrischen Passung das Potential haben eine Gleittransmission zu begünstigen. In wie weit die jeweiligen Werte herangezogen werden können, z.B. als Größe für eine Transmissionswahrscheinlichkeit bzw. -Intensität sei an dieser Stelle zunächst noch offen.

Trotzdem ist diese Darstellungsvariante ein erstes und äußerst praktisches Zwischenergebnis der *STRONG*-Methode, um ein Gefühl – qualitativ, wie quantitativ – für die geometrische Kompatibilität der benachbarten Gleitsysteme (auf der Korngrenze) zu entwickeln.

An dieser Stelle sei abermals erwähnt, dass die Werte dieser Gleitsystemkopplungsmatrix stets nur für eine ganz bestimmte Korngrenzenkonfiguration gelten und sich die einzelnen Einträge für andere Korngrenzenorientierungen komplett, mehr oder minder stark, verändern. Da im allgemeinen und realen Szenario in den seltensten Fällen die (lokale) dreidimensionale Lage der Korngrenze bekannt ist, wird im Folgenden ein probabilistischer Ansatz verfolgt, der die stellenweise systembedingte Unkenntnis eines oder beider Korngrenzenparameter ein Stück weit kompensieren soll, um trotzdem zu aussagekräftigen Bewertungen zu gelangen.

### 4.3 Berücksichtigung der Korngrenzenorientierung

Da jede individuelle Korngrenzenorientierung  $\vec{n}(\delta, \varepsilon)$  mit einer eigenen Gleitsystemkopplungsmatrix verbunden ist, hat dies zur Konsequenz, dass man bei z.B. 1°-scharfer Variation von  $\delta$  und  $\varepsilon$  in Summe folglich 180 mal 180, also 32.400 Kopplungsmatrizen zu betrachten hat. Die Vorstellung mehr als zweiunddreißigtausend 12x12-Matrizen so zu erfassen oder gar darzustellen, um daraus etwaige Aussagen abzuleiten scheint im ersten Moment etwas befremdlich. Die Lösung dieses Darstellungsproblems liegt jedoch mit einem Wechsel der Perspektive greifbar nahe, wie die folgende Darstellung verdeutlichen soll.

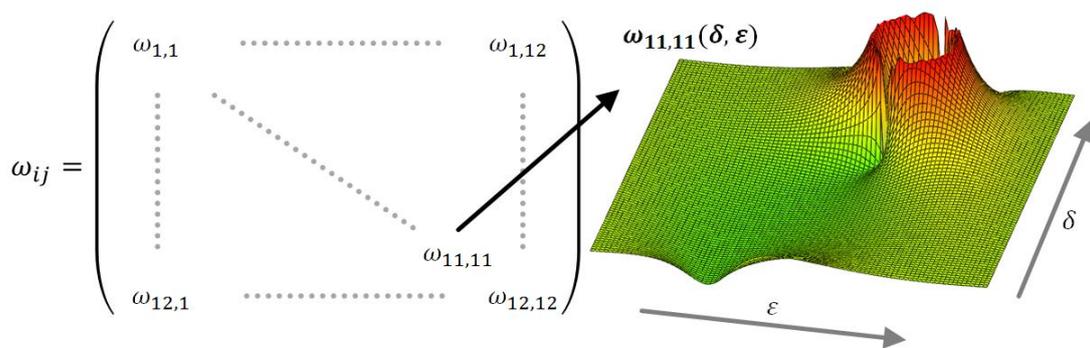


Abb. 4-7: Bei variabler Korngrenzenorientierung wird jeder Matrixeintrag zu einer Funktion der Korngrenzenparameter  $\delta$  und  $\varepsilon$

Ausgehend von den 144 Einträgen der 12x12-Matrix wird nun nicht mehr der jeweils skalare Wert  $\omega_{i,j}$  betrachtet, sondern dessen funktionale Abhängigkeit für variable  $\delta$  und  $\varepsilon$ . An die Stelle einer einfachen Zahl rückt somit eine Funktion als Einzelement der Gesamtmatrix. In Summe erhält man auf diese Weise insgesamt 144 unterschiedliche Funktionsverläufe, die jeweils einer individuellen Beurteilung bedürfen. Dies erfolgt, indem gedanklich für jede Gleitsystemkopplung  $i, j$  jeweils alle möglichen Korngrenzenkonfigurationen  $(\delta, \varepsilon)$  „durchgespielt“ werden. Abb. 4-7 zeigt beispielhaft wie

ein einzelner der solchen Funktionsverläufe, hier  $\omega_{11,11}(\delta, \varepsilon)$  für die Kopplung  $i = 11$  und (zufälligerweise auch)  $j = 11$  aussehen kann. Da alle  $\omega_{i,j}(\delta, \varepsilon)$  von zwei unabhängigen Variablen abhängen, lassen sich die einzelnen Funktionswerte entweder in der verbleibenden dritten Raumdimension darstellen oder aber als Werte in einem 2D-Ergebnisfeld (z.B. als Matrix). Letztere Darstellung liefert wiederum gestützt durch eine farbliche Codierung eine praktische Handhabung.

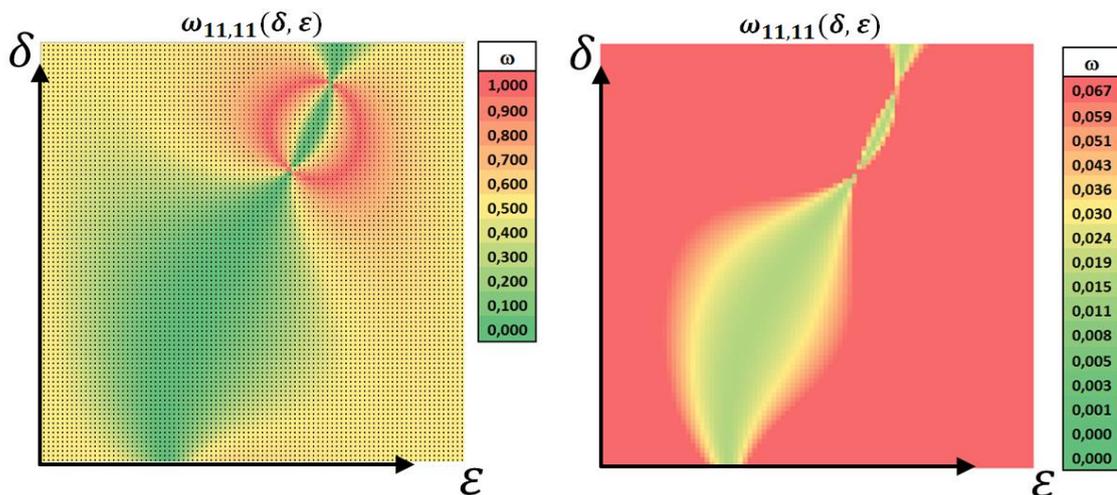


Abb. 4-8: 2D-Kacheldarstellung der Kopplungsfunktion in Abhängigkeit von  $\delta$  und  $\varepsilon$

In der Darstellungsvariante in Abb. 4-8 repräsentiert jedes Pixel exakt einen zu einem Wertepaar  $(\delta, \varepsilon)$  gehörenden Funktionswert, der (rechts) zusätzlich gemäß der bereits eingeführten  $\omega$ -Grenzwertkonvention farbcodiert ist. Auf diese Weise lässt sich direkt und intuitiv erfassen welche Korngrenzenorientierungen zu geometrisch guten Passungen – im Sinne von niedrigeren Widerstandswerten, respektive erhöhter Transmissions-tendenz – führen (grüne Bereiche) und welche nicht (rote Bereiche). Wohlgermerkt repräsentiert eine solche „quadratische Farbkachel“ stets genau nur eine einzige mögliche Kopplung (hier Gleitsystem 11 in Korn A mit zufälligerweise ebenfalls Gleitsystem 11 in Korn B).

Um erneut von der einzelnen Gleitsystemkopplung zu einer Gesamtschau zu gelangen werden schlicht alle 144 dieser Plots (im Folgenden konsequent Farbkacheln genannt) als Elemente der 12x12-Grundmatrix gemäß der nachfolgenden Abbildung dargestellt, welche der Logik der Nomenklatur folgend als „Farbkachelmatrix“ bezeichnet wird.

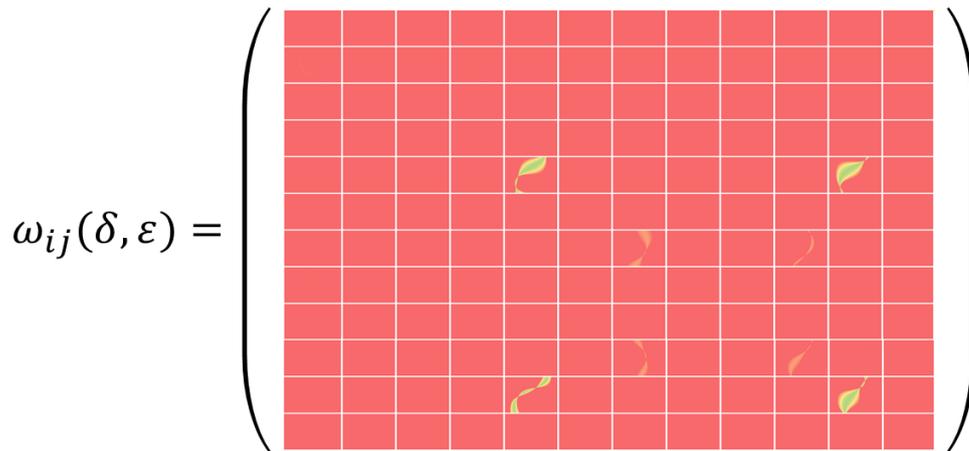


Abb. 4-9: Ganzheitliche Erfassung aller Gleitsystemkopplung für alle Korngrenzenorientierungen mittels der sog. Farbkachelmatrix

Mit dieser Matrixdarstellung liefert die *STRONG*-Methode eine Ergebnisdarstellung, die trotz der enormen Zahlenflut der insgesamt  $(12 \times 12) \times (180 \times 180) = 4.665.600$  Einzelwerte, eine intuitive Übersicht liefert, die es erlaubt mit nahezu einem Blick zu erfassen, wie gut die Gesamtgleitsystemkopplung im Allgemeinen ausfällt, aber auch bezogen auf jede einzelne Kopplung und dies unter Berücksichtigung aller möglichen Korngrenzenkonfigurationen. In diesem Beispiel fällt u.a. sofort ins Auge, dass nahezu fast alle Kopplungen – gekennzeichnet durch einheitlich rote Kacheln – keine geometrische Passung aufweisen. Lediglich 8 Kacheln beinhalten – und dies auch nur teilweise – mehr oder minder stark ausgeprägte grün-gelb Verläufe, also  $(\delta, \varepsilon)$ -Bereiche mit Korngrenzenorientierungen für die die einzelnen Widerstandswerte  $\omega(\delta, \varepsilon)$  kleiner als 0,067 ausfallen. Weiterführende Gedanken bzgl. möglicher Interpretationen oder der Extraktion von Aussagen werden im Ergebnis- und Diskussionsteil dieser Arbeit angestellt.

#### 4.4 Berücksichtigung der Schmidfaktor-Kopplung

Eine Fragestellung die bereits hier erörtert werden soll, ist die Frage nach möglichen Vereinfachungen und Reduktionen. Da die Farbkachelmatrix die geometrischen Passungen aller Gleitsystemkombinationen unabhängig von deren tatsächlicher Aktivität abbildet, ließe sich an dieser Stelle der Einfluss einer definierten Belastungsrichtung implementieren. Eine bestimmte Vorzugsrichtung hat nämlich zur Folge, dass gemäß dem Schmidchen Schubspannungsgesetz nicht auf allen Gleitsystemen dieselben Scherspannungen „abfallen“. Unabhängig von einem tatsächlichen Spannungsbetrag definiert alleine die geometrische Lage zwischen Gefüge und Zugachse, welche Schmidfaktoren den einzelnen Gleitsystemen zuzuordnen sind. Die folgende Abbildung

listet in der linken Tabellenübersicht die jeweils 12 Schmidfaktoren der beiden benachbarten Körner auf, während die Matrix auf der rechten Seite alle 144 möglichen Kopp-  
lungskombinationen der einzelnen Schmidfaktoren erfasst.

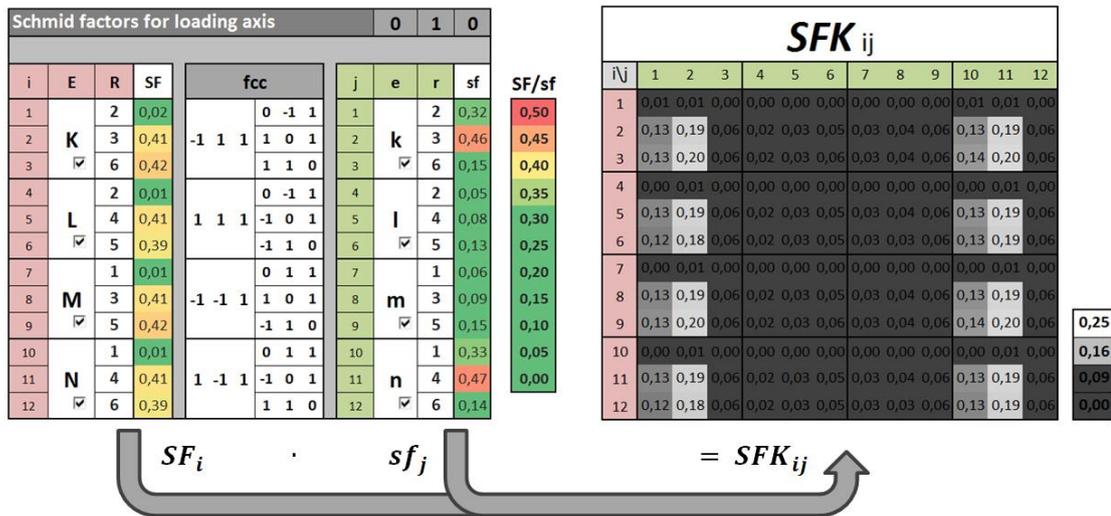


Abb. 4-10: Berechnung der 144 Schmidfaktorkopplungen als Kombination der je 12 einzelnen Schmidfaktoren aus Korn A und Korn B. Zur Vermeidung von Fehlinterpretationen bezüglich der Farblogik seien die Schmidfaktorkopplungen im Folgenden zusätzlich durch eine kontinuierliche Graustufencodierung hervorgehoben.

Diese sogenannte Schmidfaktorkopplung (SFK) verknüpft lediglich die beiden Schmidfaktoren einer Gleitsystemkombination, in dem beide Faktoren miteinander multipliziert werden. Auf diese Weise – natürlich unter der Annahme eines global homogenen von außen bestimmten Spannungsfeldes – erhält man eine Übersicht bei welchen Kopplungen unter diesen Voraussetzungen überhaupt gemeinsame Gleitsystemaktivität zu erwarten ist. Mit diesem Ergebnis kann somit eine erste Einschränkung erfolgen, um beispielsweise die Farbkachelmatrix auf tatsächlich (schmidfaktorkopplungs-)relevante Kopplungen zu beschränken. Die inaktiven (grau unterlegten) Kopplungen werden im Folgenden im wörtlichen Sinne ausgeblendet.

$$\omega_{ij}(\delta, \varepsilon) \circ SFK_{ij} = \left( \begin{array}{cccccccccccc} \text{[Grid with red and green cells]} \end{array} \right)$$

Abb. 4-11: Eingrenzung der Farbkachelmatrix durch Ausblenden der inaktiven Kopplungen

Denn im Sinne der Beurteilung einer Schädigungstendenz muss es das Ziel der *STRONG*-Methode sein, neben der rein geometrischen Passung auch die tatsächliche Aktivität einer möglichen Gleitsystemkopplung zu identifizieren. Die sich an dieser Stelle aufdrängende Frage ist – analog zur Abgrenzungsproblematik zwischen guter und schlechter geometrischer Passung – wo sich diese sogenannte Aktivität quantitativ von der Inaktivität abgrenzt. Zunächst besteht keine Notwendigkeit einer fixen Abgrenzung. Vorerst soll die quantitative Einteilung ausreichen, die sich durch die eingeführte Graustufenskala ergibt: Kopplungen mit hoher gemeinsamer Aktivität (hellgrau bis weiß) und solche mit niedriger Aktivität (grau bis dunkelgrau). Auf diese Weise rücken die hellen, also relevanten, Kopplungen automatisch in den Fokus des Betrachters, während die (dunkel)grau unterlegten Zahlenwerte ganz bewusst nur noch schwer zu erfassen sind.

Eine weitere Reduktion der Problematik kann in vielen anwendungsnahen Fällen durch die teilweise Erfassung der Korngrenzenlage durch zumindest einen Parameter erfolgen. Üblicherweise ist dies der an der Oberfläche zugängliche Twistwinkel  $\delta$ , dessen Größe anhand des jeweiligen Verlaufs der einzelnen Korngrenzen des Gefüges in den meisten Fällen gut angenähert werden kann, wie die folgende Darstellung in Abb. 4-12 verdeutlichen soll.

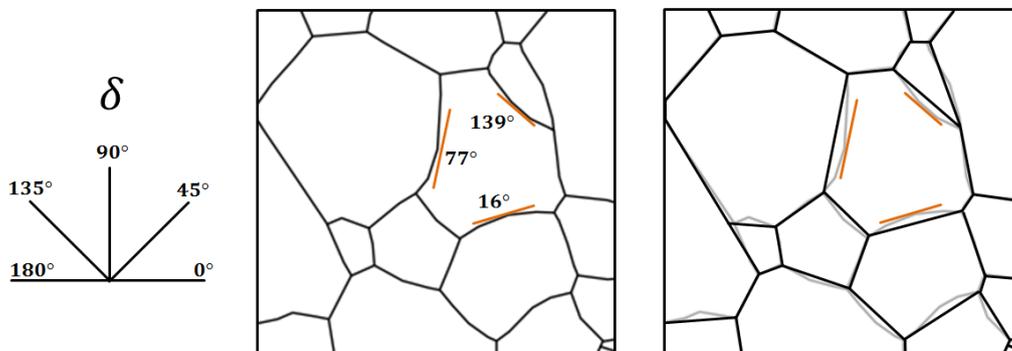


Abb. 4-12: Eingrenzung der möglichen Korngrenzenorientierung durch Bestimmung des durch den Verlauf der Korngrenzenlinie erfassbaren Twistwinkels  $\delta$

Mit diesem Ansatz reduziert sich die zweidimensionale Funktion  $\omega(\delta, \varepsilon)$  auf nur noch eine Abhängigkeit, nämlich von dem in der Regel nicht direkt zugänglichen Tiefenverlauf  $\varepsilon$ .

## 4.5 Reduktion auf die $\varepsilon$ -Abhängigkeit

Da die Farbkachelmatrix alle 180x180 möglichen Korngrenzenparameterpaare  $(\delta, \varepsilon)$  beinhaltet, lassen sich die Kopplungswerte  $\omega(\varepsilon)$  für einem bekannten  $\delta$ -Wert in der entsprechenden Zeile einfach auslesen.

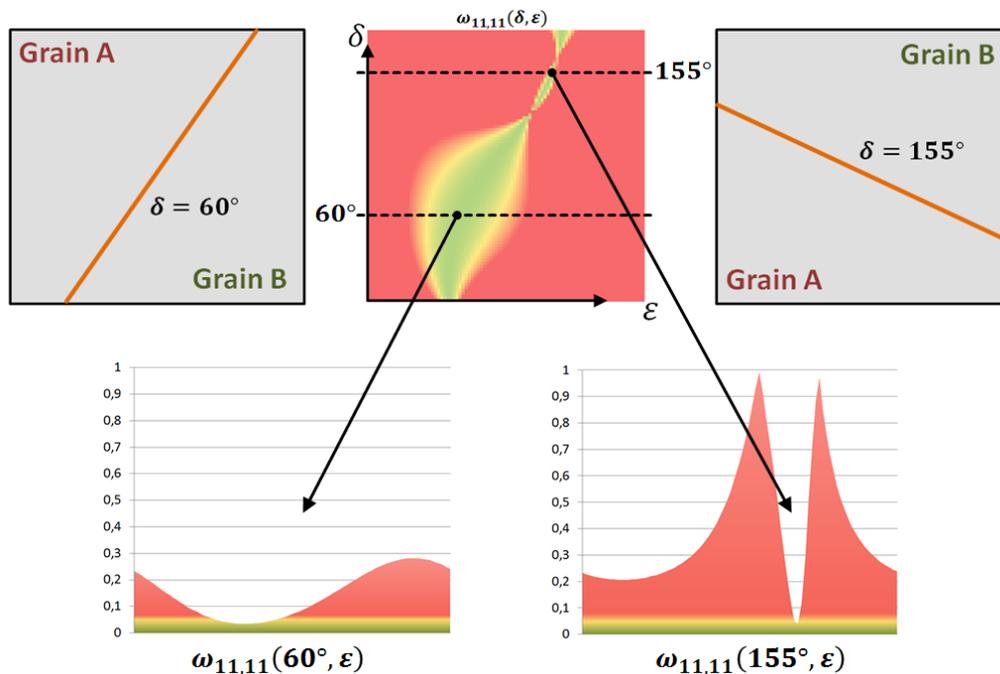


Abb. 4-13: Schematische Darstellung der Reduktion der Korngrenzenorientierung von zwei Parametern  $\delta$  und  $\varepsilon$ , auf eine reine  $\varepsilon$ -Abhängigkeit, für zwei beispielhaft gewählte Twistwinkel  $\delta = 60^\circ$  bzw.  $\delta = 155^\circ$  bei sonst völlig identischen Rahmenbedingungen.

Wie unterschiedlich sich nun deren funktionaler Verlauf in Abhängigkeit von  $\varepsilon$  ausprägen kann, soll der Vergleich zwischen den Kurven für  $\delta = 60^\circ$  bzw.  $\delta = 155^\circ$  veranschaulichen. D.h. also, dass man trotz der eigentlichen Unkenntnis über die tatsächliche Neigung der Korngrenze unterhalb der Oberfläche, allein aufgrund deren Verlauf an der Oberfläche eine Abschätzung über deren grundsätzliches Passungsverhalten anstellen kann.

Diese Abschätzung basiert auf einem probabilistischen Ansatz, indem zunächst einfach alle möglichen  $\varepsilon$ -Werte angenommen werden und danach berechnet wird, wie groß die Anzahl von  $\varepsilon$ -Werten ist, die potentiell zu geometrisch guten Passungen führen. Die dahinterstehende Idee macht die Annahme, dass diese Anzahl mit der Wahrscheinlichkeit für eine gute Passung korrelieren soll. In obigem Beispiel fällt hierbei sofort ins Auge, dass der Funktionsverlauf  $\omega(\varepsilon)$  für  $\delta = 60^\circ$  verglichen mit  $\delta = 155^\circ$  insgesamt zu niedrigeren Werten führt und in Summe viel flacher verläuft.

Die beiden gezeigten Plots stellen wiederum nur den Verlauf einer einzigen Gleitsystemkopplung dar. Um erneut zu einer Gesamtdarstellung zu gelangen müssen analog zur Farbkachelmatrix alle 144 Plots gleichzeitig erfasst werden. Im Sinne einer übersichtlichen Darstellung erfolgt dies über einen Zwischenschritt, in dem die  $\omega_{ij}(\varepsilon)$  Kurven zunächst oberhalb des 0,067-Grenzwertes abgeschnitten werden, da nur das darunter befindliche Werte-Spektrum,  $0 < \omega < 0,067$ , von Interesse ist. Außerdem erübrigt sich aufgrund der Variablenreduktion auf nur noch eine Abhängigkeit die Notwendigkeit einer Farbcodierung der Funktionswerte. Um trotzdem einen intuitiven Eindruck vom relevanten Kurvenverlauf zu erhalten – im Sinne der Frage, wie groß der  $\varepsilon$ -Bereich geometrisch günstiger Passungen ausfällt – bietet sich eine einheitliche Einfärbung der Fläche unterhalb der Kurve an. Dieser Zwischenschritt – Zuschneiden und einheitliche Einfärbung (blau) – soll durch die folgende Abbildung verdeutlicht werden.

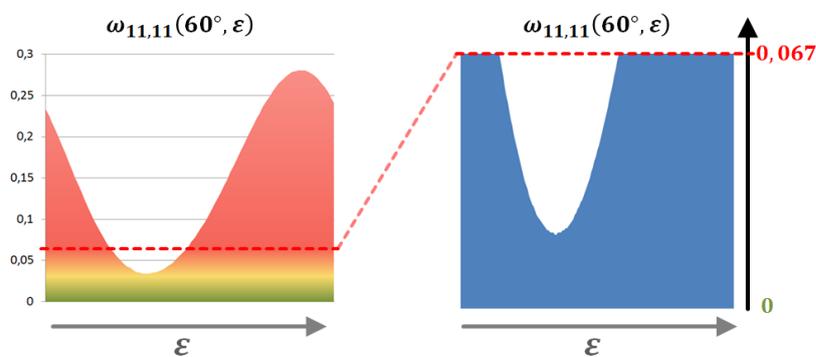


Abb. 4-14: Wechsel der Farblogik (von grün-gelb-rot zu weiß-blau) nach der Reduktion auf nur noch eine Variable  $\varepsilon$

Nach diesem Zwischenschritt erhält man für jede Gleitsystemkopplung eine individuelle „weiß/blau Kachel“, deren weiß-zu-blau-Anteil zunächst qualitativ ausdrückt, wie sich die Tendenz für eine geometrisch günstige Passung verhält. Gemäß der gleichen Logik, die bereits bei der Visualisierung der Farbkachelmatrix Anwendung fand, ergibt sich die auf einen bestimmten  $\delta$ -Wert reduzierte Gesamtmatrix wie folgt:

$$\omega_{ij}(\varepsilon) = \left( \begin{array}{c} \text{12x12 grid of blue squares} \end{array} \right)$$

Abb. 4-15: Darstellung der Gesamtmatrix als Reduktion der Farbkachelmatrix für einen bestimmten Wert  $\delta$

Hierbei bringen die komplett blau ausgefüllten Kacheln zum Ausdruck, dass bei diesen Kopplungen sämtliche Passungswerte oberhalb des Grenzwertes liegen. Nur jene Kacheln, die auch Weißanteile beinhalten zeigen – je nach  $\varepsilon$ -Wert – Bereiche in denen günstige Gleitsystempassungen liegen. Die in Abschnitt 4.4 eingeführte Berücksichtigung der Gleitsystemaktivitäten bezogen auf die Schmidfaktorkopplungen sind hier analog anwendbar. Denn bei dem konkreten anwendungsbezogenen Einsatz der *STRONG*-Methode erfolgt eine Beschränkung auf die tatsächlich relevanten Gleitsysteme automatisch, indem beispielsweise die aktiven Gleitsysteme identifiziert werden.

Im folgenden Ergebniskapitel werden die verschiedenen Anwendungsfälle der *STRONG*-Methode aufgeführt, mit dem Ziel einer deskriptiven Darstellung der beobachteten Prozesse, wie u.a. Gleitlinientransfer, Risstransfer und Rissentstehung u.a. am Beispiel einer Zwillingskorngrenze. Wie die Aussagen der *STRONG*-Methode in Zusammenschau mit den Erkenntnissen vergangener und gegenwärtiger Forschung interpretiert werden können, wird in dem sich daran anschließenden Diskussionsteil erörtert werden.

Doch zunächst soll im Folgenden und letzten Abschnitt dieses Kapitels das Anwendungsprinzip der *STRONG*-Methode anhand eines demonstrativen Beispiels zusammengefasst dargestellt werden.

## 4.6 Zusammenfassung des Anwendungsprinzips

Die folgende Übersicht zeigt anhand eines konkreten Beispiels (Probe 2, Korngrenze 71) wie die *STRONG*-Methode anzuwenden ist. Als Inputdaten liegen zunächst die beiden Eulerwinkeltripel der beiden Körner A und B vor, sowie die Orientierung der Zugachse (vgl. Abb. 4-16).

Im Fall (I) lässt sich aufgrund des stark gekrümmten Korngrenzenverlaufs keine sinnvolle Abschätzung der Korngrenzenlage anstellen, zumal deren Verlauf unterhalb der Oberfläche gänzlich verborgen bleibt. Im zweiten Fall (II) liegt nur eine leichte Korngrößenkrümmung vor, so dass eine tangentielle Annäherung des in der Oberfläche liegenden Twistwinkels  $\delta$  möglich ist. Der Tiefenverlauf der Korngrenze bleibt weiterhin unbekannt. Erst im dritten Fall (III), wenn eine zusätzliche Abschätzung der Tiefenneigung der Korngrenze möglich ist, kann die räumliche Lage der Korngrenze als näherungsweise bekannt angenommen werden.

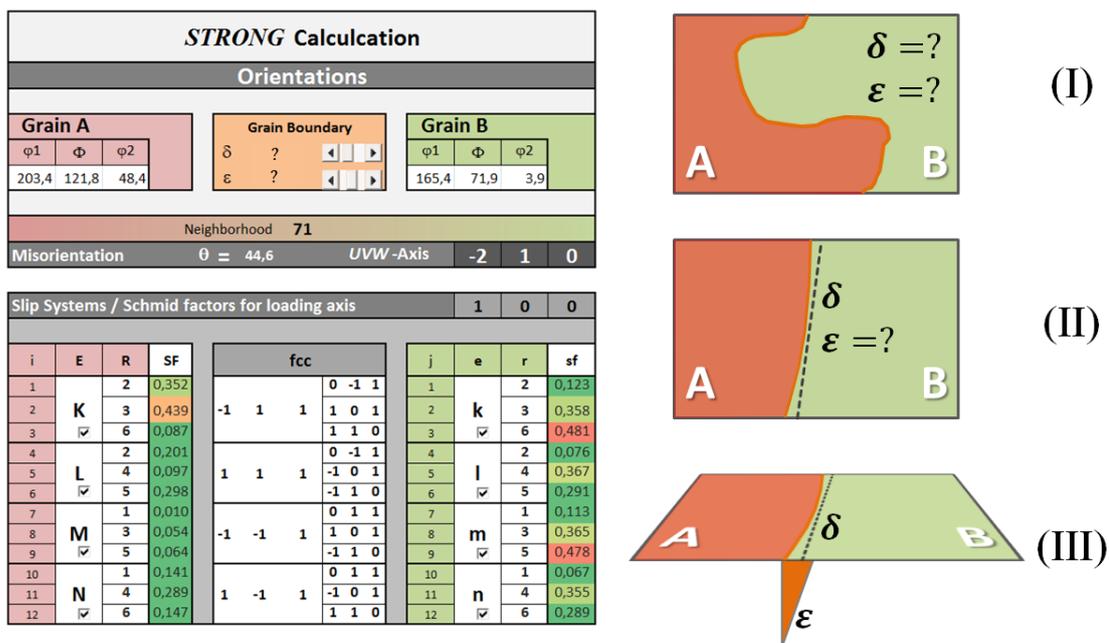


Abb. 4-16: Anwendungsprinzip der *STRONG*-Methode

(linke Seite) Inputdaten: die Kornorientierungen A und B, die Orientierung (räumliche Lage) der Korngrenze  $\delta$  und  $\varepsilon$ , abhängig davon ob die Parameter bekannt sind oder nicht, gehen sie als konkrete Werte ein oder bleiben variabel (symbolisiert durch die Fragezeichen), die Zugrichtung definiert die Verteilung der Schmidfaktoren auf den einzelnen Gleitsystemen, (rechts) mögliche Szenarien:  
 (I) Korngrenzenlage gänzlich unbekannt, (II) oberflächlich näherungsweise bekannt ( $\delta$ ) und (III) vollständige Kenntnis der dreidimensionalen Korngrenzenorientierung ( $\delta$ ,  $\varepsilon$ )

Die dazugehörigen Gleitsystemkopplungsmatrizen  $\omega_{ij}(\delta, \varepsilon)$ ,  $\omega_{ij}(\varepsilon)$  und  $\omega_{ij}$ , sowie die korrespondierenden Schmidfaktorkopplungsmatrix stellen sich wie folgt dar:

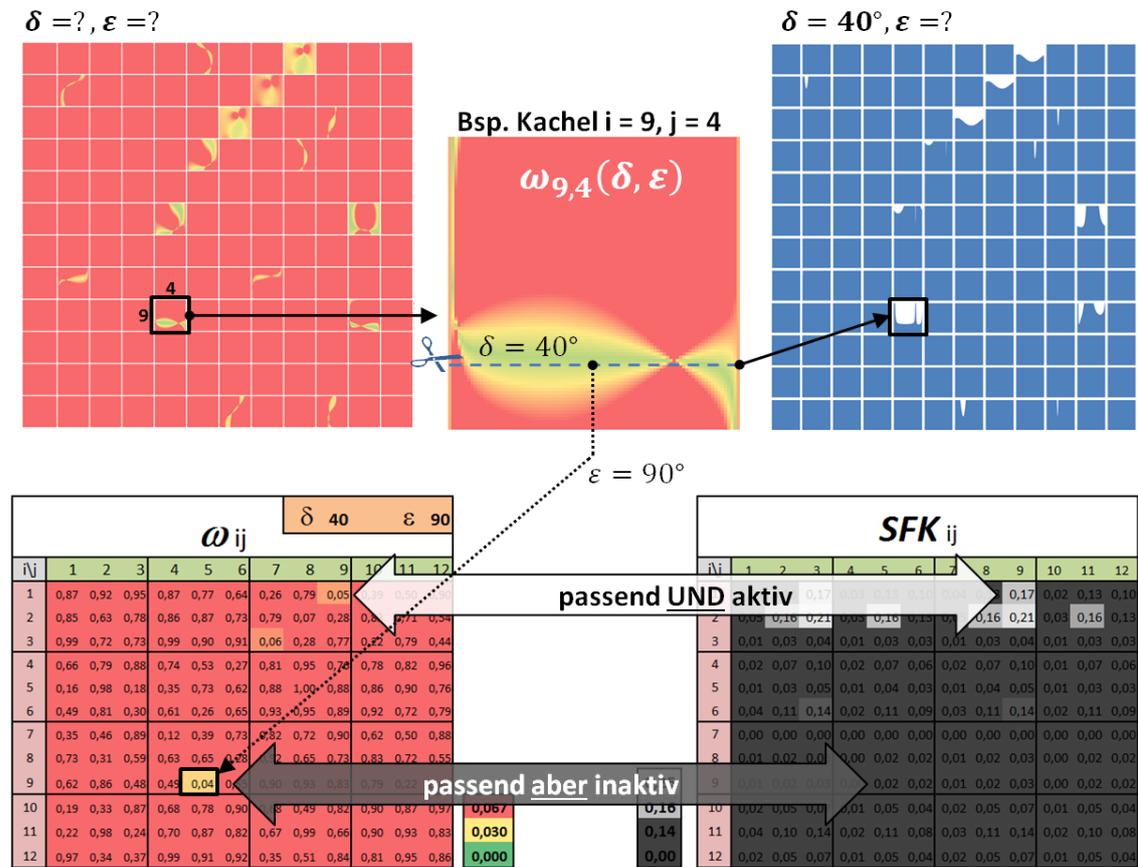


Abb. 4-17: Darstellung der Kopplungsmatrizen für die Szenarien (I), (II), (II), sowie der Schmidfaktorkopplungen. Beispielhaft ist Kachel (9-4) aufgeführt, in der bei Kenntnis beider Parameter, mit einem Wert von 0,04, die beste geometrische Gleitsystempassung zu finden ist, wenngleich für diese Kopplung nur eine äußerst geringe gemeinsame Gleitsystemaktivität ausgewiesen wird. Die Kopplung (1-9) erfüllt hingegen beide Kriterien. (Passung: 0,05 und Aktivität: 0,17)

Trotz der grundsätzlichen Missorientierung von  $44,6^\circ$  zwischen beiden Körnern A und B, beinhaltet die Farbkachelmatrix mehrere Kacheln, die mehr oder minder verhältnismäßig große grün-gelb-Bereiche aufweisen, d.h. Gleitsystemkopplungen bei denen je nach Lage der Korngrenze mit erhöhter Wahrscheinlichkeit für eine geometrische Passung gerechnet werden kann. Die nebenstehende Blau-Weiß-Matrix konkretisiert diese Einschätzung bei bekanntem  $\delta = 40^\circ$  auf die reine Abhängigkeit von  $\varepsilon$ . Kann überdies auch noch der Parameter  $\varepsilon$  als bekannt vorausgesetzt werden (hier  $90^\circ$ ), so reduziert sich die Gleitsystemkopplungsmatrix auf 144 konkrete skalare  $\omega$ -Widerstandswerte, wie sie links unten aufgeführt sind. Eine Beurteilung, ob die so identifizierbaren geometrisch günstigen Kopplungen auch tatsächlich zum Tragen kommen, kann nun durch eine

vergleichende Betrachtung mit der Schmidfaktorkopplungsmatrix (rechts unten) erfolgen. In dem Beispielfall der Kopplung 9-4 lässt sich dann jedoch feststellen, dass trotz der geometrischen Passung, diese Kopplung inaktiv bleibt. Bei der geometrisch zweitgünstigsten Gleitsystemkopplung (1-9) weist die Schmidfaktorkopplungsmatrix mit einem Wert von 0,17 eine deutliche Tendenz für eine potentielle gemeinsame Gleitsystemaktivität aus, sprich, beide im Rahmen dieser Arbeit maßgeblichen Kriterien – Passung und Aktivität – sind erfüllt.

Ein Nachbarschaftsverhältnis, wie es mit diesem Gesamtbeispiel gegeben ist, sollte also eine Tendenz zur Gleittransmission durch die Korngrenze aufzeigen. Wie die folgende Gefügeaufnahme samt der sichtbaren Gleitlinien zeigt, kann diese Tendenz tatsächlich bestätigt werden. Visualisiert man die an dieser bestimmten Korngrenze vorliegenden geometrischen Gegebenheiten (rechte Bildhälfte), so erkennt man, dass die koppelnden Gleitebenen K und m mit einem Schnittwinkel von  $\alpha = 3,2^\circ$  auf der Korngrenze aufeinandertreffen. Die Burgersvektoren, die zusammen mit den jeweiligen Ebenen die aktiven Gleitsysteme (Kopplung 1-9) definieren, liegen mit einem Winkel von  $\beta = 18,1^\circ$  auseinander.

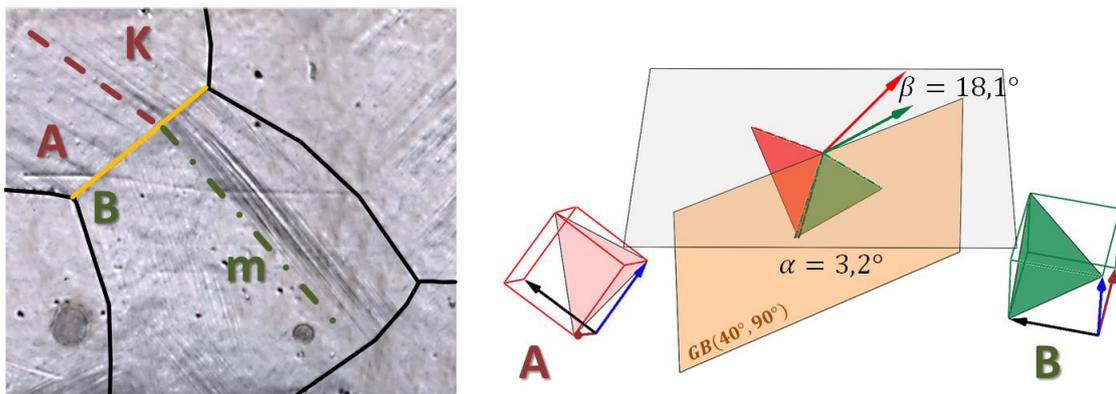


Abb. 4-18: Nachbildung des realen Szenarios zur Veranschaulichung der für den Gleittransfer relevanten Gleitsystemkopplung

Diese beiden Werte führen somit gemäß der Gleichung von Clark zu dem in der Matrix aufgeführten Widerstandswert von

$$\omega_{1,9}(\delta = 40^\circ, \varepsilon = 90^\circ) = 1 - [\cos(\alpha = 3,2^\circ) \cdot \cos(\beta = 18,1^\circ)] = 0,05 \quad (53)$$

Dieses Beispiel soll die *STRONG*-Methode in jener expliziten Ausführlichkeit bewusst und an dieser Stelle ein Mal in ihrer ganzheitlichen Form dargestellt haben, damit im folgenden Ergebnisteil stets nur die relevantesten Aussagen, im Sinne der Übersichtlichkeit und somit einer knappen Form dargestellt werden können.

## 5 Ergebnisse

Der Ergebnisteil gliedert sich in drei Hauptbereiche. Im ersten Abschnitt wird der Effekt der im Experiment beobachteten Gleitlinientransmission betrachtet. Daran anschließend widmet sich ein Abschnitt der besonderen Geometrie, wie sie im Falle der Zwillingssbeziehung auftritt mit den damit verbundenen speziellen Kopplungsphänomenen, welche eine besondere Rolle für die verschiedenen Ausprägungen von Schädigungsmechanismen wie z.B. der Rissentstehung an Zwillingsskorngrenzen spielen. Der dritte und letzte Abschnitt befasst sich mit der gezielten Untersuchung des Einflusses der lokalen Korngrenzenorientierung, wie sie beispielsweise bei einem dreidimensionalen Risstransferprozess zum Tragen kommt. Dieser Transfer über eine Korngrenze wurde mittels einer Tomographie erfasst und damit auch bezüglich der geometrischen Informationen zugänglich gemacht. Bei allen drei Vorgängen steht die Analyse der geometrischen Verhältnisse an der Korngrenze im Zentrum des Interesses, mit dem Ziel den tatsächlich physikalisch relevanten Einfluss der beteiligten Orientierungen und somit Geometrien erfassen zu können.

### 5.1 Gleitlinientransmission im statischen Zugversuch

Eine grobkorngeglühte Flachzugprobe (Probe 1, Kurzbezeichnung P1)<sup>68</sup> aus reinem Nickel wurde schrittweise statisch (dehnungskontrolliert) bis zum Bruch belastet. Aufgrund der Grobkornglühung setzten die ersten Gleitprozesse bei verhältnismäßig niedrigen Spannungen ( $< 50$  MPa) ein. Diese bereits nach dem ersten Dehnschritt von 1,5 % entstandenen Gleitlinien wurden gemäß der *STRONG*-Methode analysiert.

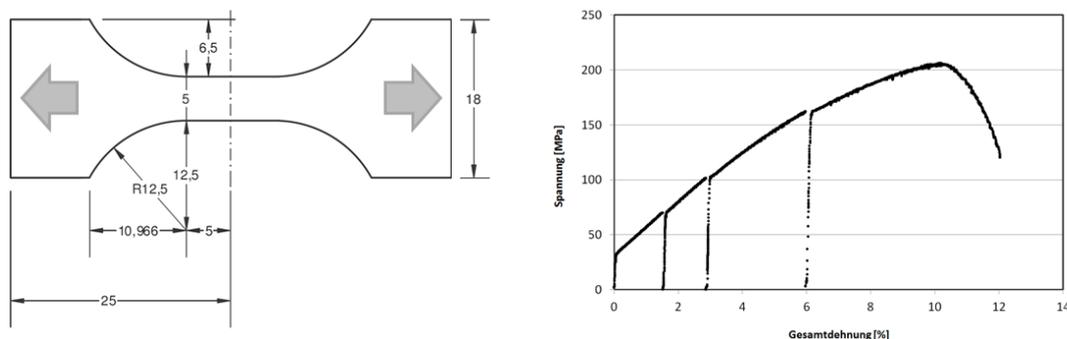


Abb. 5-1: (links) Probengeometrie und Abmessungen, (rechts) Zugkurve der Probe P1

<sup>68</sup> Eine detaillierte Beschreibung der Probenherstellung, -präparation, sowie der Charakterisierung befindet sich im Anhang.

Um eine konsequente und systematische Analyse der einzelnen Nachbarschaftsverhältnisse zu gewährleisten wurde das Korngefüge, wie es sich an der Oberfläche in Form eines Korngrenzennetzwerkes darstellt, sowohl lichtmikroskopisch als auch mittels EBSD-Scan erfasst, indem jedes Korn und jede Korngrenze durch eine eigene Nummer adressiert wurde.

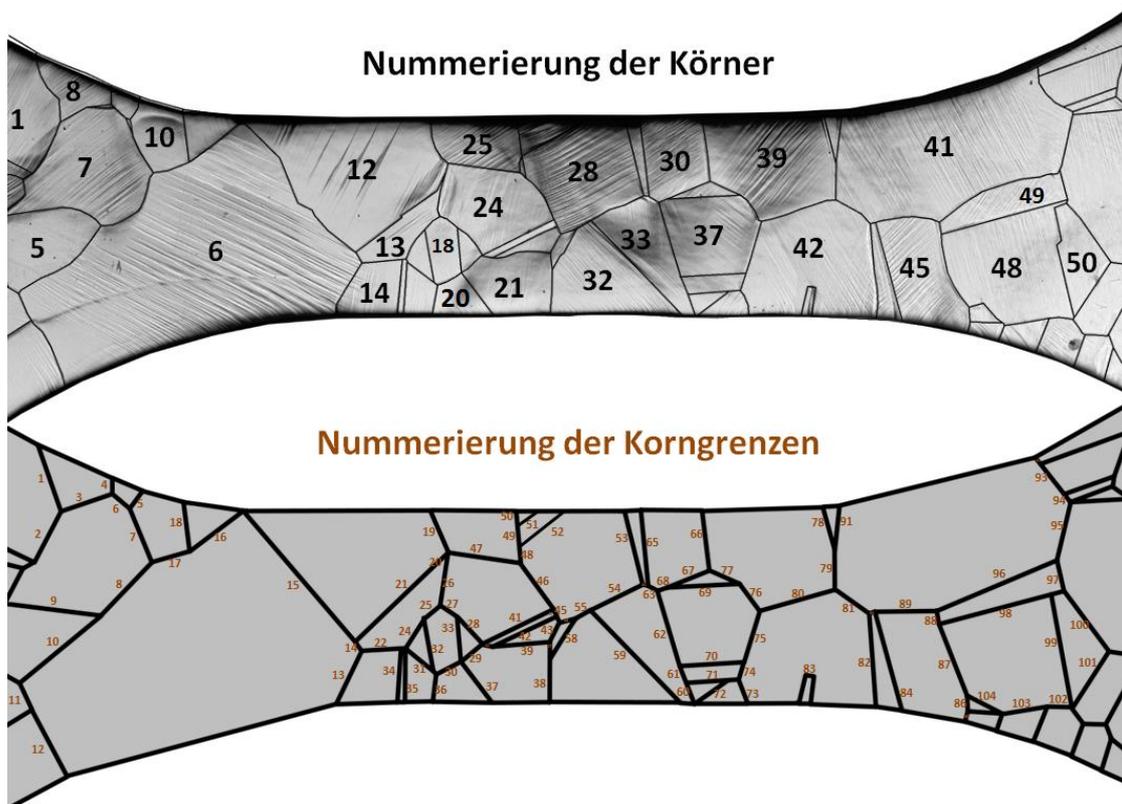


Abb. 5-2: Erfassung aller Körner und Korngrenzen mittels Nummerierung

Auf diese Weise ist es möglich jedes einzelne Nachbarschaftsverhältnis durch einen folgenden Datensatz  $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2, \Phi_1, \varphi, \Phi_2, \delta)$  zu repräsentieren. Lediglich der  $\varepsilon$ -Parameter bleibt zunächst „eigentlich“ unbekannt. Um diese Unkenntnis einzuschränken wurde die Probengeometrie in Verbindung mit der Glühbehandlung bewusst so gewählt, dass das Verhältnis zwischen Korngröße und Probendicke so ausfällt, dass erstere im Vergleich zur Dicke verhältnismäßig groß ausfällt, wie die folgende Abb. 5-3 schematisch zeigen soll. Bei einer solchen „2D-Probe“ verlaufen die Korngrenzen dann nahezu senkrecht zur Probenoberfläche<sup>69</sup>. Dieses Verhalten kann in guter Übereinstimmung durch ein Blick auf die Probenseitenflächen bestätigt werden (vgl. Abb. 5-3), weshalb diese Näherungsannahme,  $\varepsilon = 90^\circ$  auch für die nicht zugänglichen, also im Probeninneren liegenden Korngrenzen im Rahmen dieser Arbeit Anwendung finden soll.

<sup>69</sup> „Fabrication of two-dimensional microstructures in Fe-3.25%Si sheet“ M.D. GRAH, K.J. BOWMAN, M. OSTOJA-STARZEWSKI, *Scripta Metallurgica et Materialia* 26 (1992) 429-434

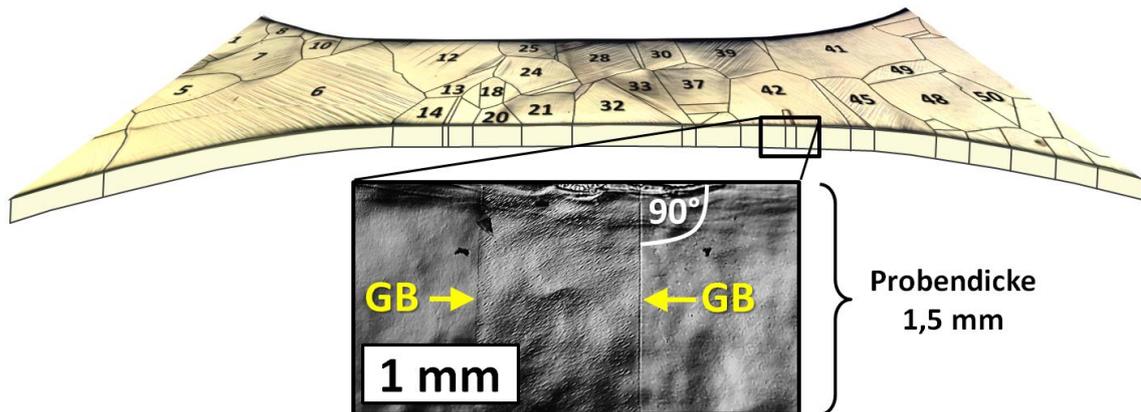


Abb. 5-3: Plausibilisierung der Annahme im Tiefenverlauf senkrechter Korngrenzen

Mit dem so für alle Korngrenzen angenommenen Wert  $\varepsilon = 90^\circ$  liegt, neben den jeweiligen  $\delta$ -Werten somit für jedes Nachbarschaftsverhältnis die vollständige Lageinformation jeder einzelnen Korngrenze vor. In Verbindung mit den benachbarten Kristallorientierungsdaten ergibt dies ein jeweils vollständiger Datensatz, welcher die gesamte (Gleitsystemkopplungs-)Geometrie zu erfassen imstande ist. Die *STRONG*-Methode kann nun also konsequent für jedes Nachbarschaftsverhältnis durchgeführt werden, mit dem Ziel zu überprüfen, ob in der Theorie günstige Gleitsystemkopplungen mit den im Experiment tatsächlich auftretenden Gleittransmissionsvorgängen übereinstimmen.

Da die anerkannte Klassifizierung von Korngrenzen in Kleinwinkel-, Großwinkel- und spezielle Korngrenzen grundsätzlich eine bewährte Kategorisierung darstellt, soll das Probengefüge, also konkret das Korngrenzenetz, zunächst in dieser Einteilung dargestellt werden, wie die folgende Abb. 5-4 zeigt. Die Kleinwinkelkorngrenzen mit einer Fehlorientierung  $\leq 15^\circ$  sind grün markiert, die Großwinkelkorngrenzen sind allesamt grau, bis auf die speziellen CSL-Korngrenzen, welche jeweils in einer charakteristischen Farbe dargestellt sind. Insgesamt wurden 104 Korngrenzen erfasst.

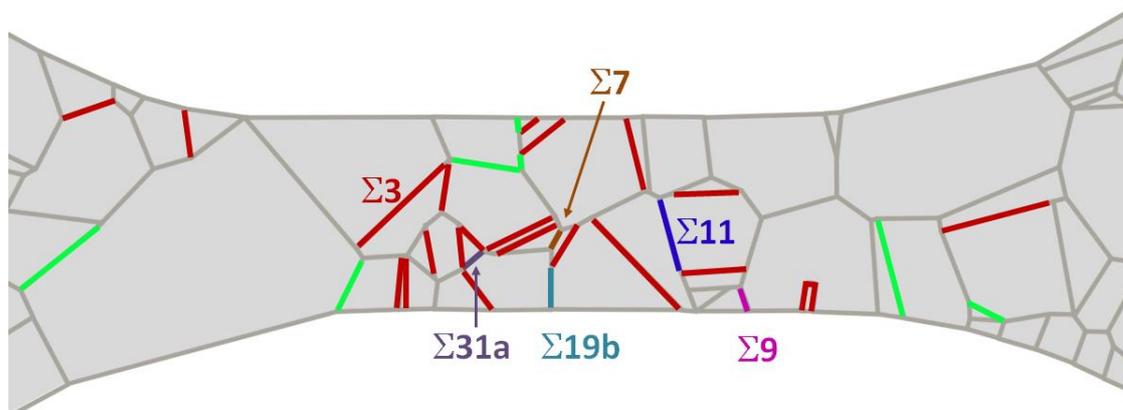


Abb. 5-4: Darstellung der einzelnen Korngrenzen bzgl. ihres Charakters (Kleinwinkel, Großwinkel bzw. spezieller Winkel inkl. CSL- $\Sigma$ -Beziehung)

Eine klassische Darstellung der Häufigkeitsverteilung der Missorientierungen gemäß Mackenzie zeigt das folgende Diagramm in Abb. 5-5. Die speziellen CSL-Korngrenzen sind entsprechend ihrer Missorientierung innerhalb der betreffenden Klasse der Häufigkeitsverteilung beinhaltet. Die  $\Sigma$ -Korngrenzen 31a, 7, 9, 19b und 11 finden sich jeweils nur einmal in den betrachteten Gefüge wieder. Von den  $\Sigma$ 3-Korngrenzen liegen hingegen 20 Stück vor.

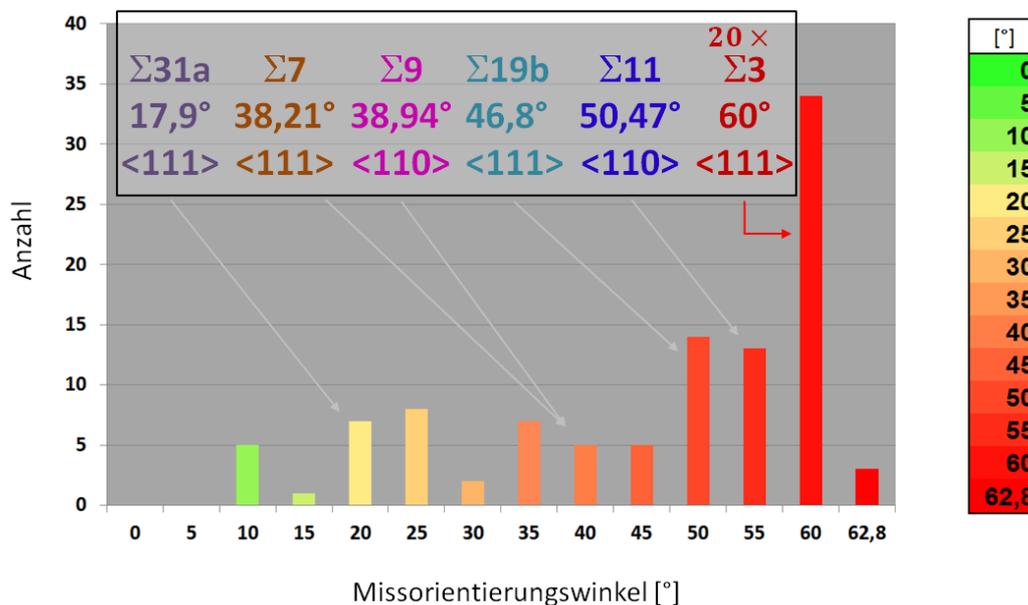


Abb. 5-5: Mackenzie-Plot der 104 betrachteten Korngrenzen

Die 5°-scharfe Aufteilung der Klassen ergibt sich zum einen aus der Anzahl der Gesamtheit, die mit lediglich 104 Nachbarschaftsverhältnissen nur bedingt für eine statistische Auswertung tauglich ist und zum anderen soll für die mit den Klassen korrespondierende Farbskalierung mit bloßem Auge für jede Klasse gerade noch unterscheidbar bleiben. Der Hintergrund für diese Maßnahme ist das Ziel einer Verfeinerung der üblichen recht groben Einteilung in Kleinwinkel- und Großwinkelkorngrenzen. Um gerade den Fehlorientierungsbereich zwischen 15° und dem (in der kubischen Symmetrie) Maximalwert von 62,8° besser zu erfassen, bietet sich eine feine Einteilung dieses Spektrums an. Entsprechend der Farbskala lässt sich dann jede einzelne Korngrenze in eine der Klassen einteilen und somit visualisieren, so dass sich in der Gesamtschau eine Gefüge-Map (vgl. Abb. 5-6) erstellen lässt, die es erlaubt sämtliche Fehlorientierungen intuitiv zu erfassen.

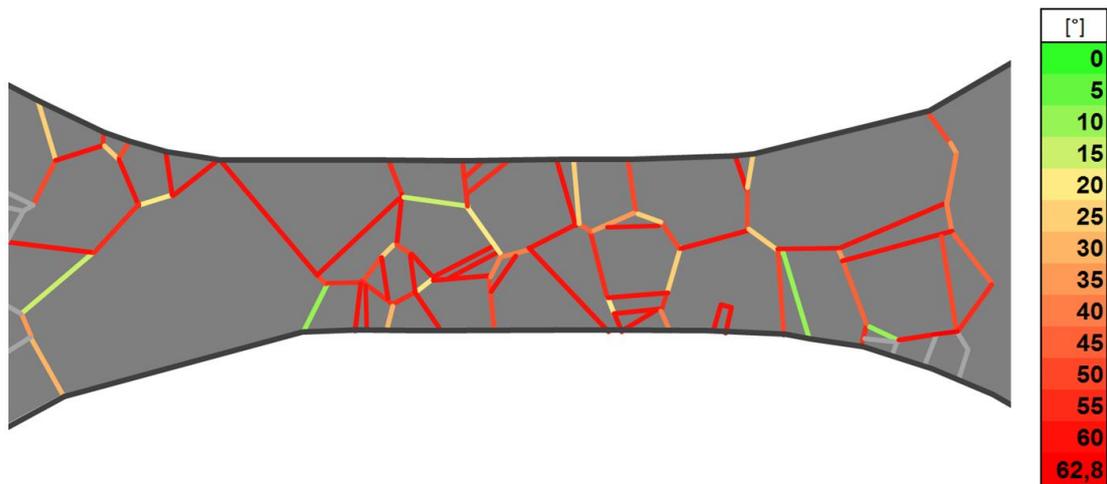


Abb. 5-6: Visualisierung der einzelnen nachbarschaftlichen Missorientierungen durch die sogenannten Miss- bzw. Fehlorientierungs-Map

Diese Darstellungsvariante der einzelnen Fehlorientierungen liefert jedoch eine wiederum nur bedingte Aussagekraft bezüglich der Lokalisierung von Korngrenzen, die tendenziell für Gleittransferprozesse in Frage kommen. Trotzdem verbirgt sich hinter diesem Darstellungskonzept eine Logik, die hingegen im Falle der möglichen Visualisierung von Fehlpassungen, das gewünschte Ergebnis erzielen könnte. Um diesen Schritt, von einer Fehlorientierungs-Map zu einer Fehlpassungs-Map zu gelangen müssen zunächst systematisch einzelne experimentell beobachtbare Gleittransferprozesse studiert werden, um die Frage zu klären, ob und wie es möglich ist, die im Kapitel 4 eingeführten Gleitsystemkopplungs-Matrizen letztlich auf einen skalaren Wert zu reduzieren, der ansatzweise im Stande sein soll die Fehlpassung eines Nachbarschaftsverhältnisses zu repräsentieren.

Im folgenden Unterabschnitt werden hierzu zwei gegenüberliegende Nachbarn eines gemeinsamen Zentralkorns betrachtet von denen der eine Nachbar die Transmission verhindert, der andere hingegen einen Gleittransfer erlaubt, obwohl beide Nachbarschaftsverhältnisse nahezu die gleiche Fehlorientierung besitzen.

### 5.1.1 Einzelfallbetrachtung: Blockade und Transfer

Durch eine systematische Beobachtung der, von Korn zu Korn, individuellen Gleitlinienverläufe in der lokalen Umgebung der einzelnen Korngrenzen lassen sich sowohl das Blockieren, als auch das Passieren von Gleitlinien beobachten. Die blockierte Gleitung zeichnet sich dadurch aus, dass die Gleitlinien eines Nachbarn bis unmittelbar an die Korngrenze reichen und diese mitunter sogar leicht aufwölben, was im Interferenzkontrast des Lichtmikroskops durch einen ausgeprägten Schattenwurf erkennbar wird. Der Gleittransfer hingegen erfolgt, in dem die Gleitlinien sich unter Abknicken ins Nachbarkorn fortsetzen ohne die oberflächliche Korngrenzentopographie merkbar zu beeinflussen. Das folgende Beispiel zeigt die beiden beschriebenen Phänomene anhand zweier Nachbarschaften bezüglich ein und desselben Korn in der Mitte (Korn A). Während zu dem Nachbar (Korn C) die Gleittransmission blockiert wird, passieren die Gleitlinien auf der gegenüberliegenden Seite (zu Korn B) die Korngrenze.

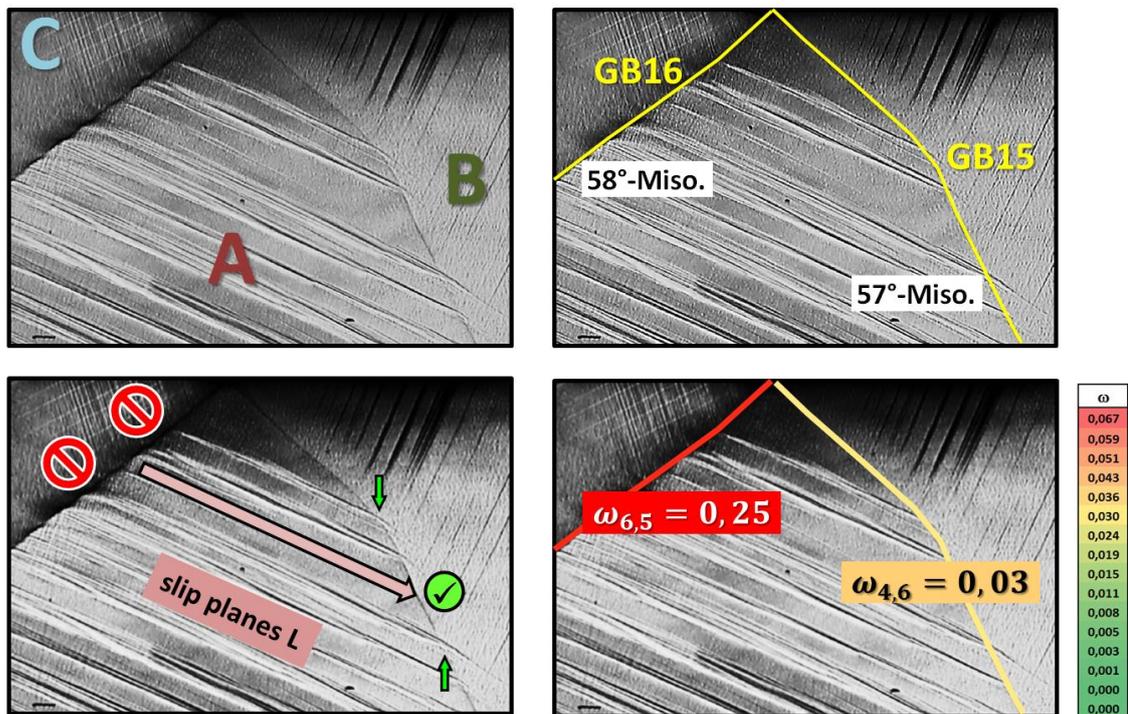


Abb. 5-7: Experimentelle Bestätigung des Fehlpassungscharakters. Ein großer Korngrenzenwiderstand ( $0,25 \gg 0,067$ ) verhindert die Transmission (Nachbarschaft A-C), ein Widerstandswert unterhalb des Grenzwertes ( $0,03 < 0,067$ ) erlaubt die Transmission (A-B)

Da sich beide Nachbarschaften, AB sowie AC, durch die nahezu gleiche Fehlorientierung auszeichnen,  $57^\circ$  bzw.  $58^\circ$ , wird abermals deutlich, dass die alleinige Angabe der Missorientierung nicht in der Lage ist, den Effekt der geometrischen Passung zu beschreiben. Denn letztere ist es, die im Rahmen der *STRONG*-Methode die relevante Größe darstellt, um die Tendenz zur Blockade respektive zur Transmission durch die Korngrenze zu erfassen.

Um den ersten und gleichzeitig auch allgemeineren Fall des Blockierens (Korngrenze GB16, vgl. Abb. 5-7) im Rahmen des *STRONG*-Modells zu erklären, zeigt die gemeinsame Betrachtung der zugehörigen Gleitsystem- und der Schmidfaktorkopplungsmatrix, dass die Kombinationen jener Gleitsysteme, die in den beiden Körnern (A und C) aktiv sind, nicht mit geometrisch „günstigen“ Passungen einhergehen, wie die folgende Darstellung zeigt.

GB16 - A C $\omega_{ij}$													GB16 - A C SFK $ij$													
		k						l						m						n						
E\e	R\l	2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6	2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6	
	i\j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
K	2	1	0,95	0,50	0,45	0,95	0,39	0,44	0,97	0,76	0,73	0,94	0,38	0,44	0,04	0,01	0,06	0,07	0,08	0,01	0,02	0,04	0,02	0,00	0,03	0,03
	3	2	0,43	0,82	0,25	0,43	0,63	0,79	0,82	0,92	0,90	0,61	0,63	0,24	0,05	0,02	0,07	0,08	0,09	0,01	0,03	0,05	0,02	0,00	0,03	0,03
	6	3	0,48	0,68	0,80	0,48	0,76	0,24	0,79	0,85	0,63	0,55	0,75	0,80	0,01	0,00	0,01	0,01	0,02	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	0,01
L	2	4	0,94	0,48	0,43	0,94	0,37	0,43	0,94	0,24	0,41	0,94	0,37	0,43	0,13	0,14	0,02	0,04	0,07	0,03	0,01	0,05	0,05	0,00	0,00	0,00
	4	5	0,44	0,21	0,76	0,44	0,88	0,57	0,64	0,74	0,87	0,62	0,68	0,86	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	5	6	0,39	0,72	0,66	0,39	0,25	0,86	0,66	0,74	0,87	0,62	0,68	0,86	0,08	0,09	0,11	0,13	0,15	0,02	0,04	0,08	0,04	0,01	0,05	0,06
M	1	7	0,99	0,75	0,76	0,99	0,79	0,80	0,26	0,58	0,68	0,02	0,55	0,47	0,01	0,00	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
	3	8	0,68	0,90	0,58	0,67	0,79	0,88	0,64	0,83	0,81	0,52	0,54	0,07	0,05	0,01	0,06	0,07	0,08	0,01	0,02	0,04	0,02	0,00	0,03	0,03
	5	9	0,66	0,85	0,82	0,66	0,58	0,92	0,62	0,75	0,87	0,50	0,09	0,60	0,04	0,01	0,05	0,06	0,07	0,01	0,02	0,03	0,02	0,00	0,02	0,03
N	1	10	0,99	0,78	0,79	0,99	0,82	0,83	0,01	0,44	0,57	0,64	0,58	0,60	0,01	0,03	0,01	0,01	0,03	0,01	0,00	0,03	0,01	0,00	0,02	0,02
	4	11	0,73	0,62	0,89	0,73	0,94	0,79	0,56	0,03	0,41	0,66	0,88	0,81	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	6	12	0,74	0,84	0,90	0,74	0,88	0,62	0,45	0,59	0,04	0,76	0,81	0,81	0,04	0,01	0,05	0,06	0,06	0,01	0,02	0,03	0,01	0,00	0,02	0,02

Abb. 5-8: Verknüpfende Betrachtung von Gleitsystem- und Schmidfaktorkopplungsmatrix zur Prüfung, ob Kompatibilität und Aktivität in Einklang stehen, was hier nicht der Fall ist.

Die verknüpfende Betrachtung (vgl. die Pfeile in Abb. 5-8) beider Matrizen gestaltet sich wie folgt: Zunächst sei angemerkt, dass die Reihenfolge der Betrachtung grundsätzlich keine Rolle spielt, sprich, ob zuerst nach günstigen Passungen geschaut wird und dann die Prüfung erfolgt, ob jene Kopplungen auch aktiv sind, oder das ganze umgekehrt. Dennoch soll es ja gerade die Aufgabe der jeweils zugrundeliegenden Farbcodierungen sein, den Blick auf die relevanten Kopplungen zu lenken. So fällt z.B. bei der Betrachtung der Schmidfaktorkopplungen direkt ins Auge, dass sich eine potentielle gemeinsame Gleitsystemaktivität auf nur wenige mögliche Gleitsystemkopplungen beschränkt. Ein Vergleich mit den hierzu korrespondierenden Passungen (in der Widerstandsmatrix  $\omega_{ij}$  auf der linken Seite) zeigt, dass deren Werte allesamt jenseits des 0,067-Grenzwertes liegen. In diesem Fall treffen also Aktivität, aber jedoch mangelnde Passung aufeinander, was schließlich die Blockierungswirkung der Korngrenze erklärt, wie sie auch deutlich im Experiment zutage tritt.

Der genau gegenläufige Fall liegt für das gegenüberliegende Nachbarschaftsverhältnis AB vor (Korngrenze GB15, vgl. Abb. 5-7). Hier fallen gute geometrische Passung und gleichzeitige Gleitsystemaktivität teilweise zusammen, was gemeinsam und im Sinne der *STRONG*-Methode betrachtet, die Voraussetzungen für das Auftreten von Gleittransmission begründet.

GB15 - AB $\omega_{ij}$													$\delta$ 130		$\varepsilon$ 90	
E\e	R\i	j	k			l			m			n				
			2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6		
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12		
K	2	1	0,66	0,63	0,96	0,46	0,56	0,02	0,61	0,41	0,02	0,80	0,77	0,97		
	3	2	0,99	0,46	0,47	0,98	0,61	0,58	0,56	0,14	0,59	0,77	0,79	0,56		
	6	3	0,68	0,83	0,51	0,48	0,95	0,43	0,17	0,74	0,43	0,56	0,97	0,59		
L	2	4	0,54	0,49	0,95	0,47	0,56	0,03	0,57	0,47	0,13	0,92	0,91	0,99		
	4	5	0,16	0,59	0,57	0,02	0,47	0,55	0,37	0,57	0,60	0,00	0,00	0,00		
	5	6	0,62	0,90	0,52	0,55	0,03	0,47	0,62	0,90	0,53	0,91	0,79	0,88		
M	1	7	0,73	0,58	0,85	0,92	0,90	0,98	0,61	0,66	0,95	0,15	0,42	0,73		
	3	8	0,99	0,52	0,53	1,00	0,93	0,93	0,80	0,61	0,81	0,57	0,61	0,18		
	5	9	0,75	0,94	0,68	0,92	0,84	0,91	0,81	0,95	0,76	0,59	0,03	0,45		
N	1	10	0,55	0,29	0,74	0,79	0,73	0,95	0,86	0,88	0,98	0,44	0,61	0,82		
	4	11	0,06	0,54	0,52	0,55	0,76	0,80	0,99	0,92	0,93	0,98	0,65	0,67		
	6	12	0,51	0,75	0,26	0,77	0,98	0,74	0,87	0,96	0,91	0,46	0,97	0,49		

GB15 - AB SFK $ij$														
E\e	R\i	j	k			l			m			n		
			2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
K	2	1	0,00	0,08	0,08	0,00	0,08	0,08	0,00	0,08	0,08	0,00	0,08	0,08
	3	2	0,00	0,10	0,09	0,00	0,10	0,10	0,00	0,10	0,09	0,00	0,10	0,10
	6	3	0,00	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02
L	2	4	0,00	0,15	0,15	0,00	0,15	0,15	0,01	0,15	0,14	0,01	0,15	0,15
	4	5	0,00	0,15	0,15	0,00	0,15	0,15	0,00	0,15	0,16	0,01	0,15	0,16
	5	6	0,00	0,15	0,15	0,00	0,15	0,15	0,00	0,15	0,15	0,01	0,15	0,15
M	1	7	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01
	3	8	0,00	0,08	0,08	0,00	0,08	0,09	0,00	0,08	0,08	0,00	0,08	0,09
	5	9	0,00	0,07	0,07	0,00	0,07	0,07	0,00	0,07	0,07	0,00	0,07	0,07
N	1	10	0,00	0,06	0,06	0,00	0,06	0,06	0,00	0,06	0,06	0,00	0,06	0,06
	4	11	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01
	6	12	0,00	0,06	0,06	0,00	0,07	0,07	0,00	0,07	0,06	0,00	0,06	0,07

Abb. 5-9: Vergleichende Betrachtung von Passungs- und Aktivitätsmatrix. Zwei Gleitsystemkopplungen (die weiß umrandeten) erfüllen beide Kriterien – gemeinsame Gleitsystemaktivität verbunden mit geometrisch günstiger Passung. Bei allen anderen Kopplungen treffen entweder Aktivität auf schlechte Passung, gute Passung auf Inaktivität oder aber, dass keines der beiden Kriterien erfüllt wird.

Die Kopplungsmatrix für die Nachbarschaft AB weist grundsätzlich sechs Einträge mit geometrisch günstigen Passungen auf. Dass jedoch nur zwei dieser Kopplungen auch tatsächlich für einen Gleittransferprozess in Frage kommen liegt wiederum an der betragsmäßigen Ausprägung der Schmid'schen Kopplungsfaktoren. Bzw. umgekehrt betrachtet gehen nur zwei der potentiell 16 (hellgrauen) aktiven Gleitsystemkopplungen mit geometrisch günstiger Passung einher, wie Abb. 5-9 verdeutlicht.

Wo nun ein für das Auftreten von Gleittransmission „ausreichender“ Grenzwert festzusetzen ist, ist eine zentrale Fragestellung dieser Arbeit. Denn eine solche Festsetzung ist unumgänglich, da die Einteilung zwischen „guter Passung“ und „schlechter Passung“ schlicht einer Abgrenzung bedarf. Da jedoch das geometrische Grundgerüst des *STRONG*-Modells keine materialphysikalischen Aspekte der Kristallplastizität beinhaltet, fällt eine theoretisch begründete Grenzwertsetzung aus. Also muss sich der Versuch einer Einteilung in „gut oder schlecht“ zunächst auf einen empirischen Ansatz stützen, wie er im folgenden Unterabschnitt präsentiert wird.

### 5.1.2 Fehlpassungs-Map des Gesamtgefüges

Die Logik des vorangegangenen exemplarisch dargestellten Transmissionsfalls bestand darin, im ersten Schritt zu prüfen, ob die Gleitsystemkopplungsmatrix mindestens einen Widerstandswert hergibt, der nach dem  $\omega$ -Grenzwertkonzept kleiner als 0,067 ist. Ist dies der Fall, dann kann von dem Vorliegen mindestens einer geometrisch günstigen Gleitsystemkopplung ausgegangen werden, unabhängig von deren schmidfaktorbedingten Aktivität. Dies wurde erst im zweiten Schritt einer Prüfung unterzogen, wobei somit zwei erste Erfahrungswerte gesammelt werden konnten. Bei einer Schmidfaktorkopplung von 0,15 konnte ein Gleitlinientransfer beobachtet werden, bei einem Wert von 0,08 konnte trotz geometrischer Passung hingegen kein Transmissionseffekt identifiziert werden.

Um diesen Einzelfall nun auf das gesamte Gefüge zu erweitern bedarf es einer konsekutiven Auswertung jedes einzelnen Nachbarschaftsverhältnisses. Also wurden nach oben geschilderter Reihenfolge alle 104 Korngrenzen einer *STRONG*-Analyse unterzogen, um die jeweils beste geometrische Passung zu berechnen, zunächst unabhängig jedweder Grenzwertbetrachtung. Um die so berechneten 104 Werte übersichtlich und zugleich vor dem Hintergrund einer logischen Sortierung darzustellen bietet sich die jeweilige Zuordnung zu der etablierten Fehlorientierung an. In diesem Sinne stellt das folgende Diagramm (Abb. 5-10) die einzelnen jeweils minimalen (Kopplungs-)Widerstandswerte für jede Korngrenze, aufgelistet nach deren Missorientierungswinkel dar (was jedoch dazu führt, dass die x-Achse nicht linear verläuft, da zwei oder mehr Korngrenzen die gleiche Missorientierung aufweisen können). Vereinfachend – jedoch etwas verkürzt – kann man trotzdem sagen, dass das folgende Diagramm die geometrische Fehlpassung (reduziert auf einen Minimumwert) über der Fehlorientierung aufträgt.

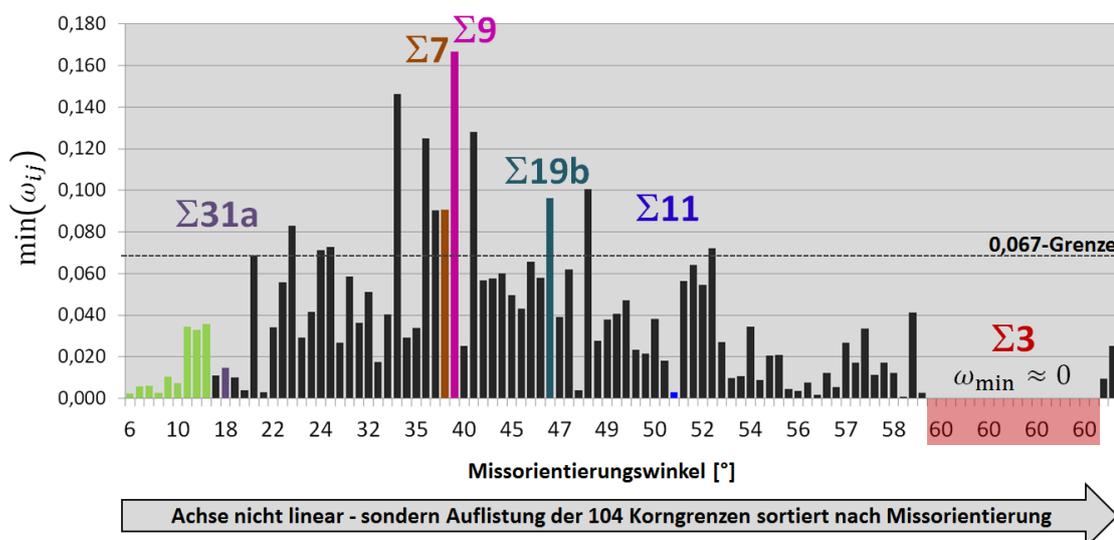


Abb. 5-10: Auftragung des jeweils kleinsten  $\omega$ -Wertes (aus der jeweiligen  $\omega$ -Matrix), der 104 betrachteten Korngrenze, aufgelistet nach deren Fehlorientierung

Auch wenn bei einer Gesamtheit von 104 Korngrenzen mitnichten von einer statistischen Aussagekraft ausgegangen werden kann, so lassen sich anhand des Diagramms dennoch mehrere Aussagen, zumindest in einer tendenziellen Weise, treffen. Dass die Kleinwinkelkorngrenzen (grüne Balken) zu guten Passungen, sprich niedrigen Widerstandswerten führen, war zu erwarten. Neue Erkenntnisse liefert jedoch der sich daran anknüpfende Bereich von Missorientierungen zwischen etwa  $20^\circ$  und  $55^\circ$ . In diesem Spektrum treten in der Gesamtschau im Mittel die höchsten Widerstandswerte auf. Extrem verhalten sich hierbei die in der Probe vorhandenen CSL- $\Sigma$ -Korngrenzen. Während die Korngrenzen  $\Sigma 7$ ,  $\Sigma 9$  und  $\Sigma 19b$  mit verhältnismäßig hohen Widerstandswerten verknüpft sind, weisen die  $\Sigma 31a$  und  $\Sigma 11$  nur geringe Fehlpassungen auf. Ebenfalls zeichnet sich die Tendenz ab, dass jenseits von Missorientierungen größer als ca.  $55^\circ$  mehrheitlich nur noch geringe Werte für  $\omega$  auftreten. Einen Spezialfall stellen die  $\Sigma 3$ -Korngrenzen dar, die aufgrund ihrer symmetriebedingten Geometrie grundsätzlich bezüglich mindestens dreier Gleitsystemkopplungen nahezu optimal ( $\omega_{\min} \approx 0$ ) zueinanderpassen. Eine detailliertere Behandlung der Besonderheiten bezüglich der Gleitsystempassung von Zwillingskorngrenzen wird deshalb in einem eigenen Abschnitt durchgeführt.

Da das Fehlpassungsdiagramm in dieser Form nur aussagt, wie groß bzw. klein die geometrisch bestmögliche Kopplung ausfällt, unabhängig von der konkreten Schmidfaktorverteilung, kann somit noch keine Beurteilung über potentiell mögliche Gleittransferprozesse erfolgen. Hierzu ist die Verknüpfung der Widerstandswerte mit den Schmidfaktorkopplungswerten notwendig. Dies erfolgt über einen weiteren Schritt, der nicht einfach den insgesamt kleinsten Widerstandswert pro Korngrenze ermittelt, sondern jenen kleinsten Wert, der gleichzeitig mit einem Schmidfaktorkopplungswert korrespondiert, der größer ist als 0,09. Diese hier festgesetzte Bedingung wird begründet durch die Beobachtung des im vorherigen Abschnitt aufgeführten Beispiels (vgl. Abb. 5-9), in dem teilweise trotz günstiger Passung keine Gleittransmission zu beobachten war, weil der Schmidfaktorkopplungswert mit einem Betrag von 0,08 offenbar zu gering ausfiel. Deshalb wird an dieser Stelle mit einem Wert 0,09, welcher dem Produkt aus zwei Schmidfaktoren von je 0,3 entspricht, als untere Schranke eingeführt. Der 0,067-Grenzwert bezüglich der Passung soll weiterhin Gültigkeit haben. Berücksichtigt man nun beide Aspekte, Passung und Schmidfaktorkopplung gemeinsam, so gelangt man zu der folgenden Darstellung (Abb. 5-11):

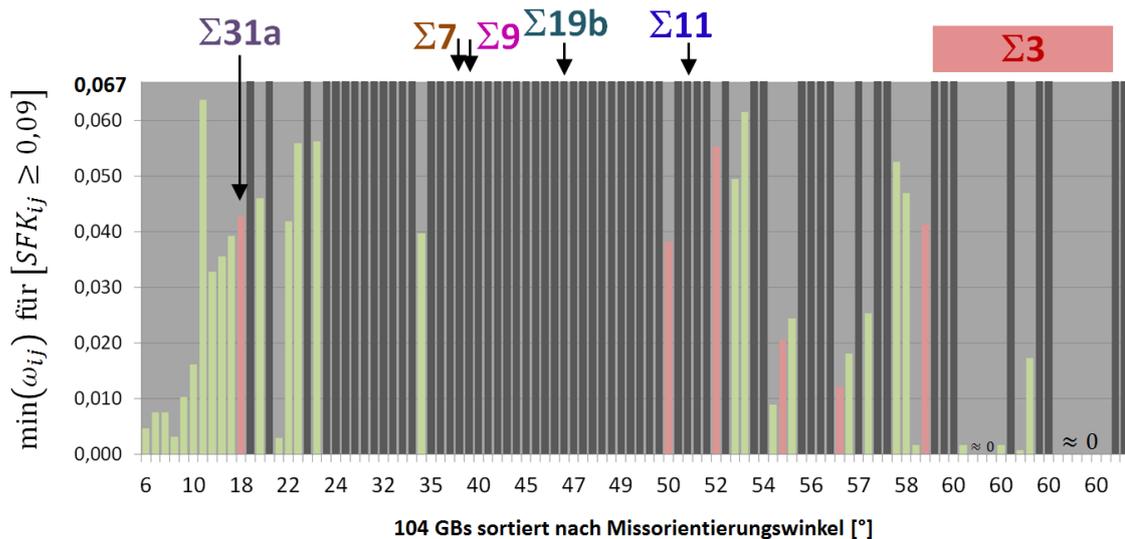


Abb. 5-11: Auftragung des jeweils kleinsten Kopplungswiderstandes für den das Aktivitätskriterium ( $SFK \geq 0,09$ ) erfüllt ist

Im Vergleich zum vorherigen Diagramm trägt diese Darstellungsvariante jene jeweils minimalen Widerstandswerte auf, welche auch das bezüglich der Schmidfaktorkopplung auferlegte Kriterium erfüllen. Die Einzelergebnisse werden erneut für jede Korn- grenze durch einen eigenen Balken repräsentiert, wobei die Wahl der Farbcodierung die verschiedenen Aussagen bezüglich der Tendenz zur Gleittransmission darstellen soll:

- graue Balken: Der Widerstandswert ist so hoch, dass keine Transmission erwartet wird.
- hellgrüne Balken: Sowohl Widerstands-, als auch der Schmidfaktorkopplungswert begründen rechnerisch die Tendenz für eine Transmission, die auch experimentell bestätigt werden kann.
- hellrote Balken: Trotz berechneter Transmissionstendenz kann die entsprechende Gleitsystemkopplung, also der Transfer von Gleitlinien, im Experiment nicht identifiziert werden.

Von den 104 in Betracht kommenden Korn- grenzen liegen somit für 44 der Nachbarschaftsverhältnisse die geometrischen Voraussetzungen für das Auftreten von Gleit- transfer vor. Bei 38 dieser Korn- grenzen kann dieser Effekt tatsächlich experimentell bestätigt werden (hellgrüne Linien). Bei den sechs anderen (hellroten Linien) kann hin- gegen kein Gleitlinientransfer bezüglich der berechneten Gleitsystemkopplung fest- gestellt werden.

Um diese Aussagen bezogen auf die Gleittransmissionstendenz der einzelnen Korn- grenzen im Gefüge zu lokalisieren, bietet sich eine Visualisierung des Korn- grenzen- netzwerkes an, welche jene Korn- grenzen, die als geometrische Barrieren fungieren schwarz darstellt und solche mit der Tendenz zur Gleittransmission durch die beschrie-

benen helle Linien. Diesem Schema folgend sind die Korngrenzen in dem nachstehend abgebildeten Gefügeausschnitt gekennzeichnet. Hierbei fällt sofort auf, dass die transmissionsaffinen (hellen) Korngrenzen im Interferenzkontrast der lichtmikroskopischen Abb. 5-12 tendenziell zu nur geringen topographischen Verwerfungen führen, während die „schwarzen“ Korngrenzen mit Barrierecharakter zu deutlichen Schattensäumen entlang ihres Grenzverlaufes führen. Da die lokale Ausbreitung der Kristallplastizität an diesen Stellen infolge der Gleitsysteminkompatibilität blockiert ist, führt der Aufstau der Gleitung sozusagen zu einer Ausstülpung in z-Richtung, also aus der Betrachtungsebene heraus. In den beiden gezeigten Transmissionsfällen (Korngrenzen GB9 und GB10) hingegen kann die Gleitung des jeweils dominierenden Kornes die Korngrenze zu seinem jeweiligen Nachbarn mehr oder minder (bei GB9 zumindest abschnittsweise) passieren, da die hierfür notwendige Gleitsystemkompatibilität gegeben ist. Diese Bedingung könnte auch erklären, warum nahezu keine topographischen Verwerfungen entlang der betreffenden Korngrenzenabschnitte festzustellen sind.

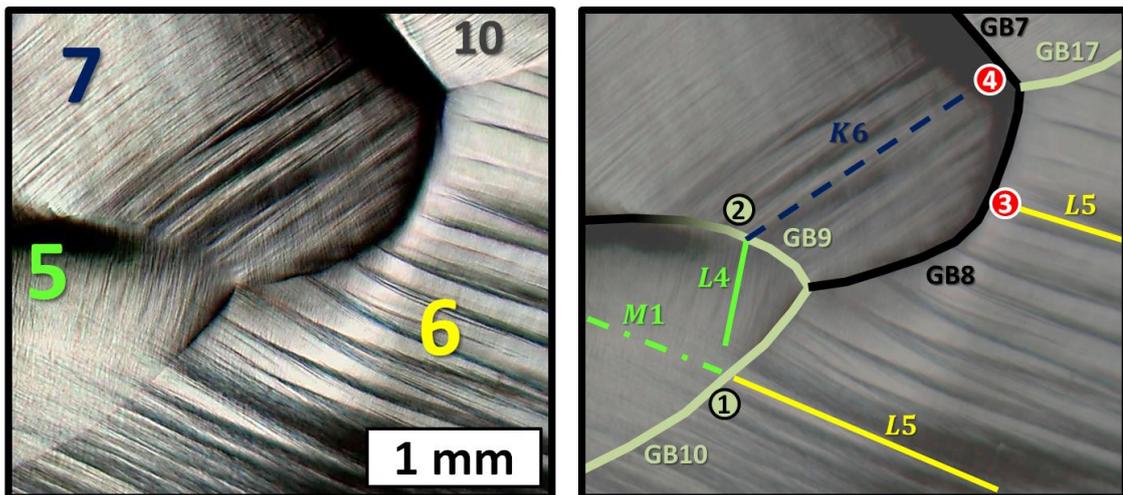


Abb. 5-12: Ausprägung der Korngrenzentopographie infolge des unterschiedlichen Passungscharakters. Stetiger Gleittransfer bei guter Passung (1) und (2), sowie massive Verwerfungen infolge von Versetzungsaufstauungen bei (3) und (4)

Um diese beiden gegenläufigen Effekte – Transmission und Blockade – anhand jeweils zweier Beispiele quantitativ zu erfassen dienen die Werte der folgenden Tabelle:

GB	Fall	A	B	Miso.	Gleitsystem i und SFi		Gleitsystem j und sfj		SFKij	$\Omega_{ij}$	$\alpha$	$\beta$		
GB10	1	6	5	10,4°	6	L5	0,377	7	M1	0,377	0,142	0,019	4,2°	10,4
GB9	2	7	5	57,1°	3	K6	0,434	5	L4	0,365	0,158	0,059	19,0°	6,1°
GB8	3	6	7	50,7°	6	L5	0,377	5	L4	0,398	0,150	0,257	39,9°	14,5°
GB7	4	7	10	56,3°	3	K6	0,434	11	N4	0,396	0,172	0,557	60,2°	27,0°

Tabelle 5-1: Detaillierte Analyse der vier in Abb. 5-12 gezeigten Kopplungsfälle

In Fall 1 liegt eine Kleinwinkelkorngrenze mit einer Fehlorientierung von  $10,4^\circ$  vor. Die Gleitlinien des dominierenden Gleitsystems von Korn 6 verlaufen bis unmittelbar zur Korngrenze und passieren diese sogar scheinbar ohne jedweden Richtungswechsel. Tatsächlich jedoch ist in dem Nachbarkorn 5 ein Gleitsystem vorhanden, das mit einem Widerstandswert von 0,016 nicht nur eine gute geometrische Passung aufweist, sondern auch einen ebenso hohen Schmidfaktor, wie das eintreffende Gleitsystem. Diese Kombination von guter Passung gepaart mit beidseitig hoher Aktivität führt effektiv dazu, dass sich die beiden Körner sozusagen gleichsinnig plastisch verformen können.

In Fall 2 dominiert in Korn 7 das Gleitsystem K6 mit einem Schmidfaktor von 0,434. Und auch in diesem Fall stoßen die zu K6 gehörenden Gleitlinien beim Erreichen der Korngrenze auf ein geometrisch passendes Gleitsystem im Nachbarkorn 5. Im Vergleich zum ersten Fall handelt es sich hierbei jedoch nicht um das hauptaktive Gleitsystem, weshalb der mit dieser Kopplung verbundene Gleittransfer sich nur auf einen Teilbereich hinter der Korngrenze beschränkt. D.h. also, dass auch in diesem Falle eine lokale korngrenzenübergreifende gemeinsame Verformung begünstigt wird, diese in ihrem Ausmaß jedoch geringer ausfällt, als im ersten Fall, wo die beste Gleitsystempassung mit der höchsten gemeinsamen Gleitsystemaktivität einherging.

Die Fälle 3 und 4 haben gemein, dass gerade jene Gleitsystemkopplungen mit den höchsten schmidfaktorbedingten Aktivitäten mit äußerst schlechten geometrischen Passungen verknüpft sind und somit zu hohen Korngrenzenwiderstandswerten führen. Aufgrund der damit verbundenen Blockierungswirkung kann eine korngrenzenübergreifende stetige Verformung nicht stattfinden, mit der Folge der deutlich erkennbaren Schattenwürfe.

Diese beispielhaft, für die in dem gezeigten Gefügeausschnitt befindlichen Korngrenzen angestellten Betrachtungen lassen sich in gleicher Weise für jede einzelne Korngrenze im gesamten erfassten Probenbereich durchführen. Deshalb stellt die folgende Abb. 5-13 das zu dem Gesamtgefüge gehörende Korngrenzennetz gemäß der erläuterten Markierungslogik dar. In dieser Darstellungsweise lässt sich nun der, jeder Korngrenze eigens zugewiesene Barriere-Charakter (schwarze Linie oder eben die Tendenz zur Gleittransmission, helle Linie) mit der tatsächlich auftretenden Transfer- bzw. Blockierungsneigung – in Form von Gleitlinientransfer bzw. Aufstau – vergleichen. Diese Vorgehensweise lässt sich exemplarisch besonders anschaulich an den einzelnen Nachbarschaftsverhältnissen des Kornes 6 verdeutlichen (die schwarzen bzw. grünen Markierungspfeile weisen auf die jeweiligen Korngrenzen hin).

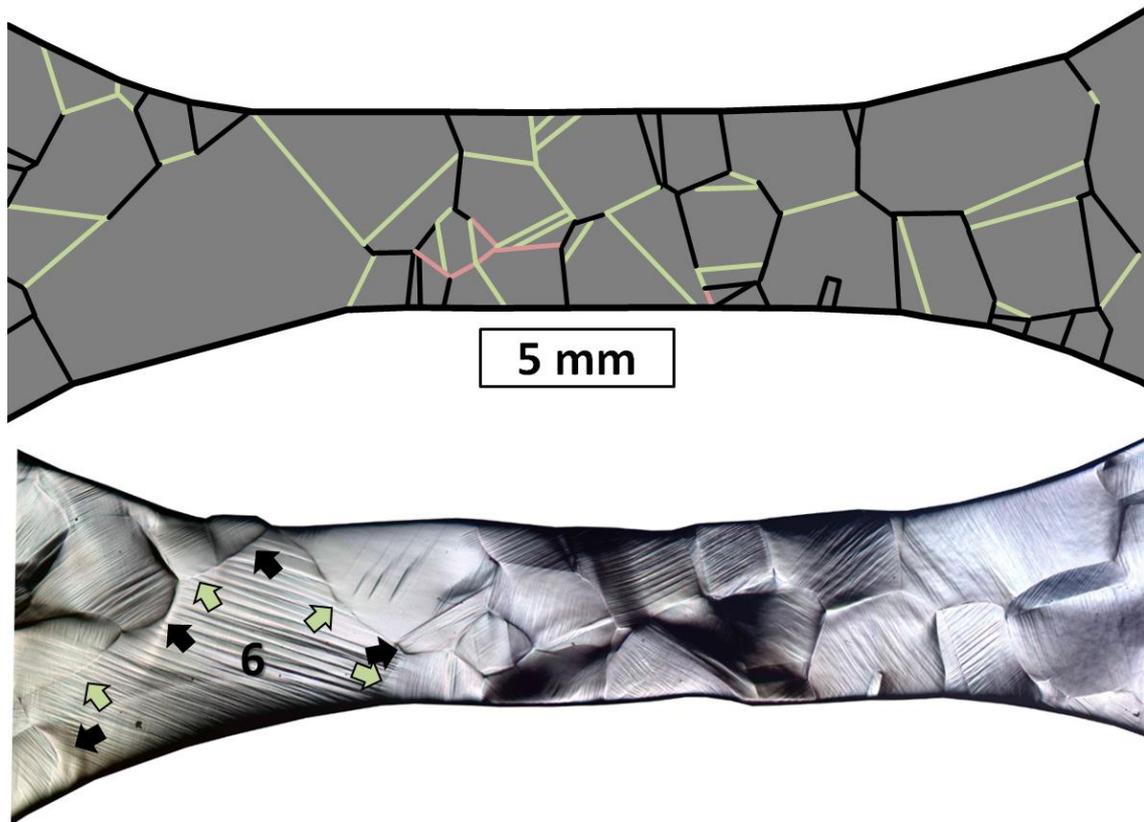


Abb. 5-13: Vergleich zwischen der berechneten Transmissionstendenz der einzelnen Korngrenzen mit dem tatsächlich auftretenden Deformationsverhalten in Korngrenzenumgebung

Mit dieser Darstellungsvariante – der Beschreibung einer Korngrenze durch deren Gleitsystemkompatibilität in Verknüpfung mit der korrespondierenden Gleitsystemaktivität – steht nun ein Ergebnis, welches in der Lage ist, die konventionelle Betrachtungsweise des Fehlorientierungscharakters einer Korngrenze, durch den in dieser Arbeit entwickelten Fehlpassungscharakter zu ergänzen oder gar zu ersetzen.

Um die mit diesem Ergebnis verbundenen Aussagen, Konsequenzen und sicherlich auch bestehenden Fragen näher zu beleuchten, werden im Diskussionsteil dieser Arbeit weitere ins Detail gehende Betrachtungen angestellt, die in gleicher Weise das Ziel verfolgen, die mit der *STRONG*-Charakterisierungsmethode verbundenen Resultate weiter zu untermauern, gleichsam aber auch kritisch zu hinterfragen.

Um an dieser Stelle einen ersten Kritikpunkt und eine noch zu beantwortende Frage zu nennen: Wie kann eine skalare Reduktion der Fehlpassungsmatrizen erfolgen, wenn die Korngrenzenorientierung teilweise oder gänzlich unbekannt ist und deren räumliche Lage somit nicht durch Näherungswerte bestimmt werden kann? Einen Spezialfall bezüglich dieser Fragestellung stellen die (kohärenten)  $\Sigma 3$ -Zwillingskorngrenzen dar, deren räumliche Lage – im Falle der Koinzidenz von Korngrenze und Symmetrieebene – bereits alleine durch die Orientierung der benachbarten Körner definiert ist und somit

keiner Näherungsannahmen bedarf. Die damit einhergehenden Konsequenzen werden ebenfalls Gegenstand der Diskussion sein. Die hierfür relevanten Ergebnisse sollen jedoch noch in dem folgenden Abschnitt dieses Kapitels Platz finden.

## 5.2 Gleitsystemkopplung bei Zwillingskorngrenzen

Die im Rahmen dieser Arbeit so zentrale Bedeutung der geometrischen Beziehungen zwischen zwei benachbarten Körnern nimmt mit der hochsymmetrischen Konstellation einer  $\Sigma 3$ -Zwillingsbeziehung eine Extremform an. Da nicht zuletzt auch die Visualisierung von nicht immer direkt zugänglichen oder intuitiv erfassbaren geometrischen Gegebenheiten ein wesentliches Element dieser Arbeit darstellt, soll die folgende Abb. 5-14 mit dem Vergleich einer Zwillingsbeziehung (inklusive der Zwillingsebene als Korngrenze) und einer allgemeinen Missorientierung (mit einer willkürlichen Korngrenze) den besonderen Charakter der Zwillingskopplung verdeutlichen.

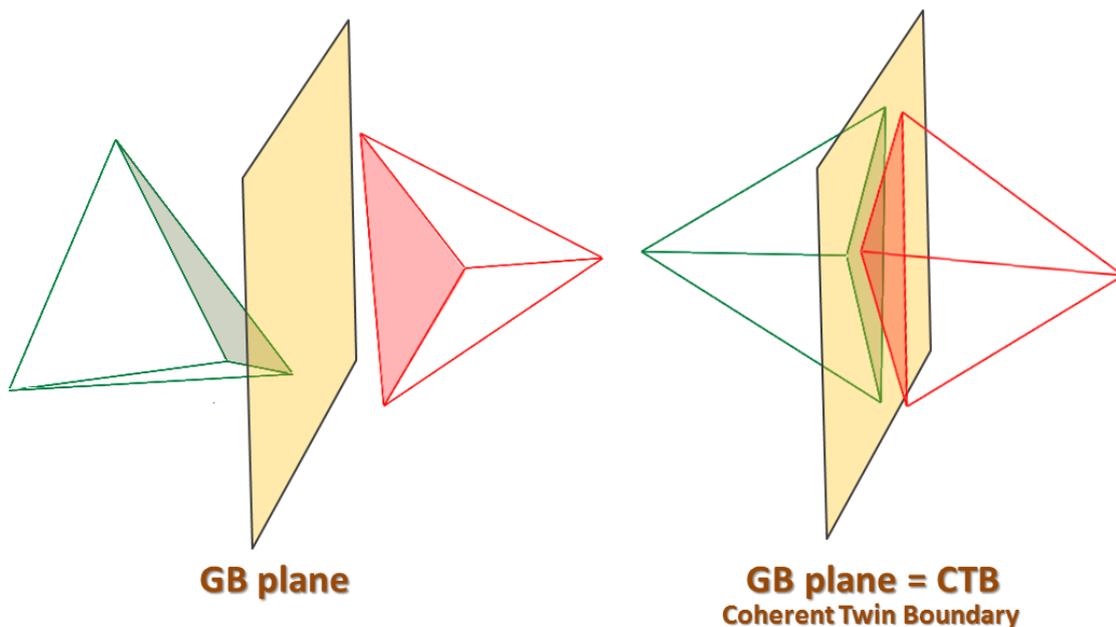


Abb. 5-14: (links) allgemeiner Fall: die zwei die Kristallorientierung repräsentierenden Tetraeder (rot und grün) liegen willkürlich bzgl. der Korngrenze (beige); (rechts) Spezialfall der kohärenten Zwillingskorngrenze, indem die benachbarten Zwillingsebenen in der Korngrenze zusammenfallen.

Während im allgemeinen Fall keine zwei – jeweils zu unterschiedlichen Körnern gehörende – Gleitebenen parallel zueinander liegen und überdies gar zusätzlich parallel zur Korngrenze verlaufen, ist exakt diese Konstellation im Falle einer kohärenten Zwillingskorngrenze gegeben. Beide Nachbarkristalle teilen sich eine gemeinsame (111)-Ebene, welche im Falle der Kohärenz gleichzeitig auch die Korngrenzeebene

ist. Bildlich ausgedrückt kann man sich die kombinierte Gleitsystemcharakteristik als zwei, sich in einer Fläche berührende Tetraeder vorstellen.

Bei einer Analyse der einzelnen Gleitsystemkombinationen mittels der *STRONG*-Methode findet sich diese Symmetrie mehrfach wieder. Während sich im allgemeinen Fall die verschiedenen Gleitebenenschnitte mit der Korngrenzenebene zwar wohldefiniert, gleichsam jedoch regellos verteilen, fallen im Zwillingfall stets zwei benachbarte Gleitebenenschnitte in der Korngrenzenebene genau zusammen (vgl. Abb. 5-15).

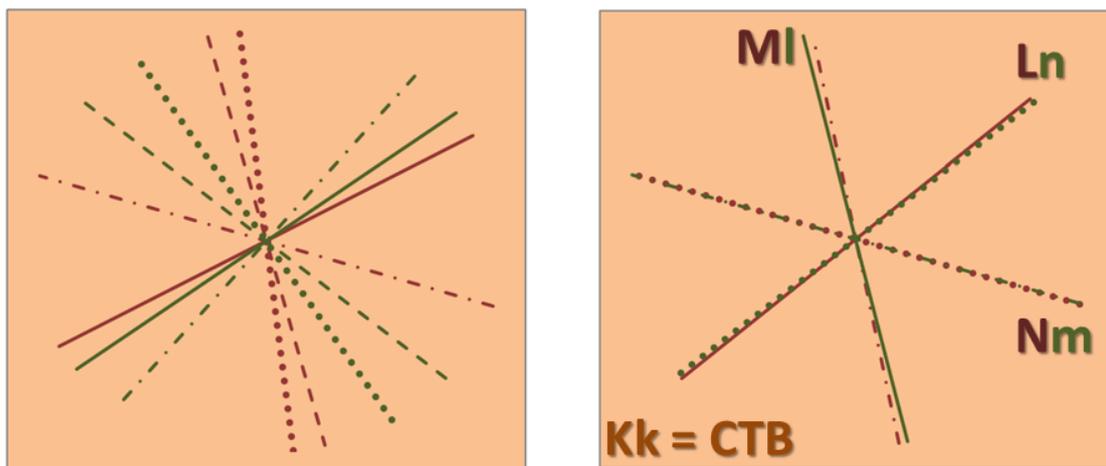


Abb. 5-15: (links) allgemeiner Fall der regellosen Verteilung der Gleitlinienschnitte in der Korngrenzenebene, während (rechts) die Schnittlinien in der gemeinsamen Zwillingsebene hochsymmetrisch ( $60^\circ$ ) angeordnet liegen.

Dieses paarweise Zusammentreffen zweier Schnittlinien führt einerseits zu verschwindenden Schnittwinkeln bei genau diesen Paarkopplungen, andererseits zu maximalen Schnittwinkeln ( $60^\circ$  bzw.  $120^\circ$ ) bezüglich aller anderen Kombinationen. Man kann also festhalten, dass die Zwillingssymmetrie zu vier (3+1) äußerst passenden Gleitebenenkopplungen führt (die +1 steht für die Pseudokopplung der beiden identischen Ebenen, K und k), aber gleichzeitig auch zu 12 restlichen ungünstigen Ebenenkopplungen.

Um eine Beurteilung der einzelnen Gleitsystemkopplungen anzustellen, muss die Betrachtung der Gleitebenen um die der Gleitrichtungen ergänzt werden. Die möglichen Gleitrichtungskombinationen lassen sich ebenfalls anschaulich aus der nachfolgenden Abb. 5-16 ableiten. In derselben Logik wie die Tetraederflächen die Gleitebenen repräsentieren, sind die Gleitrichtungen identisch mit den Tetraederkanten. Bei den zwei sich berührenden (Zwilling-)Tetraederflächen fallen jeweils auch drei Kanten paarweise zusammen, was somit zu drei – in der Theorie perfekten – Gleitsystemkopplungen führt, die jedoch mit einem uneigentlichen Kopplungscharakter verbunden sind, da die betreffenden Gleitsysteme definitionsbedingt identisch sind.

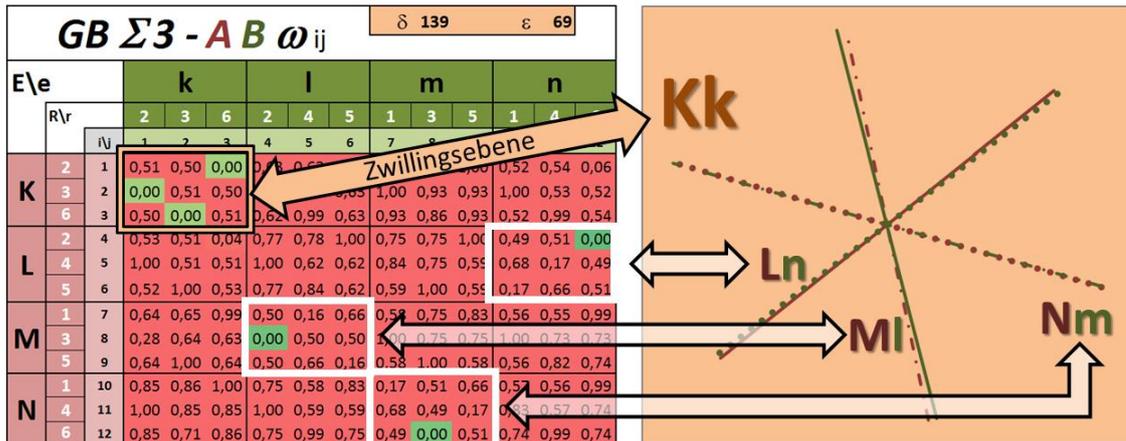


Abb. 5-16: Interpretation des Gleitebenen-Schnittbildes (rechts) mit der Gleitsystemkoppelungsmatrix einschließlich der Identifikation der jeweiligen Gleitebenenpaare

Die anderen drei Gleitebenenpaare berühren die Korngrenzenebene hingegen lediglich mit einer ihrer gemeinsamen Kanten. Nichtsdestoweniger führt dieser Umstand, dass sich die paarweise koppelnden Gleitsysteme eine Kante und somit Gleitrichtung teilen ( $\beta = 0^\circ$ ), die gleichzeitig auch in der Korngrenzenebene liegt ( $\alpha = 0^\circ$ ) zu „echten“ bestmöglichen Gleitsystemkombinationen. So passend die geometrische Kopplung in diesen 3+1 Ausnahmefällen ist, so unpassend fällt sie für umgekehrt alle anderen Kombinationen aus.

Da diese beschriebene geometrische Gesamtkonstellation grundsätzlich für alle  $\Sigma 3$ -Zwillingsbeziehungen gleich ist, fußt der individuelle Passungscharakter eines solchen Nachbarschaftsverhältnisses, wie er im konkreten Falle zu Tage tritt, deshalb auf der Frage, welche Gleitsystemkombinationen sich als tatsächlich relevant erweisen. Hierbei lassen sich drei in ihrem Grundwesen unterschiedliche Kombinationen unterscheiden:

### 5.2.1 Fall 1: Quergleitung (Cross slip)

In diesem Fall sind zwei Gleitsysteme aktiv, deren beiden Gleitebenen sich in einer gemeinsamen Tetraederkante schneiden. Je nach dem wie stark der in Richtung der Kante liegende Burgersvektor an der Abgleitung der Ebene beteiligt ist, fällt die Tendenz zum Quergleiten aus (cross slip), wie das folgende Beispiel demonstrieren soll.

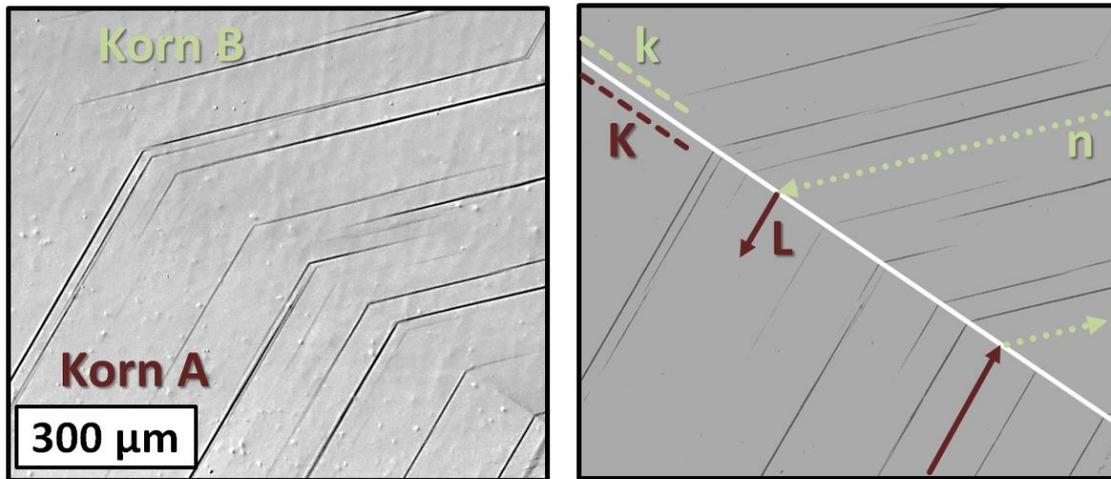


Abb. 5-17: Zwillingsbeziehung A-B mit kohärenter Korngrenze entlang der gemeinsamen Zwillings Ebenen K und k mit beidseitigem Gleitlinientransfer der Ebenen L und n

In der obigen Abb. 5-17 gezeigten lichtmikroskopischen Aufnahme des Nachbarschaftsverhältnisses A-B ist die Korngrenze an sich nur indirekt sichtbar. Vielmehr deutet sich deren Verlauf durch die einzelnen Abknickpunkte der Gleitlinien an. Die EBSD-Kornorientierungsdaten bestätigen das Vorliegen einer Zwillingskorngrenze und erlauben somit deren Identifikation. Ebenso lassen sich die beidseits der Korngrenze auftretenden Gleitlinien identifizieren. Da Gleitlinienverlauf samt Übertritt über die Korngrenze an unterschiedlichen Stellen mal von der linken, mal von der rechten Seite kommend erscheint, liegt die Vermutung nahe, dass die beiden beteiligten Gleitebenen einer Gleitebenenpaarkopplung entsprechen, welche Gleittransmission erlaubt. Ein Blick auf die Schmidfaktorkopplungsmatrix zeigt, dass in diesem Falle, eingedenk der Richtungskopplung, eine Gleitsystemkombination vorliegt, die tatsächlich auch aktiv ist und somit die Möglichkeit zum Quergleiten erlaubt.

GB $\Sigma 3$ - AB $\omega_{ij}$												$\delta$ 139		$\epsilon$ 69															
E \ e	R \ r	k			l			m			n			K	L	M	N												
		2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6																
		i \ j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11					12											
K	2	1	0,51	0,50	0,00	0,65	0,62	0,83	1,00	0,93	0,71	0,52	0,59	0,34	K	2	0,06	0,02	0,04	0,02	0,01	0,00	0,03	0,05	0,03	0,02	0,09	0,07	
	3	2	0,00	0,51	0,50	0,65	0,62	0,83	1,00	0,93	0,71	0,52	0,59	0,34		L	3	0,08	0,03	0,06	0,02	0,02	0,00	0,04	0,08	0,04	0,02	0,13	0,10
	6	3	0,50	0,00	0,51	0,65	0,62	0,83	1,00	0,93	0,71	0,52	0,59	0,34			M	6	0,03	0,01	0,02	0,01	0,01	0,00	0,01	0,03	0,01	0,01	0,04
2	4	0,53	0,51	0,04	0,77	0,78	1,00	0,75	0,75	1,00	0,49	0,51	0,00	N	4			0,08	0,03	0,06	0,02	0,02	0,00	0,04	0,08	0,04	0,02	0,12	0,10
3	5	1,00	0,51	0,51	1,00	0,62	0,62	0,84	0,75	0,59	0,68	0,17	0,49		N	5		0,06	0,02	0,04	0,02	0,01	0,00	0,03	0,06	0,03	0,02	0,09	0,07
4	6	0,52	1,00	0,53	0,77	0,84	0,62	0,59	1,00	0,59	0,17	0,66	0,51			N	7	0,05	0,02	0,04	0,02	0,01	0,00	0,02	0,05	0,03	0,01	0,08	0,07
5	7	0,64	0,65	0,99	0,50	0,76	0,66	0,58	0,75	0,83	0,56	0,55	0,99	N			9	0,02	0,02	0,00	0,02	0,02	0,00	0,03	0,07	0,04	0,02	0,12	0,09
6	8	0,28	0,64	0,63	0,00	0,00	0,00	0,02	0,02	0,00	0,03	0,07	0,04		N		10	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,01	0,02	0,01	0,01	0,03	0,03
1	9	0,64	1,00	0,64	0,50	0,66	0,16	0,58	1,00	0,58	0,56	0,82	0,74			N	11	0,14	0,04	0,10	0,04	0,03	0,01	0,07	0,14	0,07	0,04	0,22	0,18
1	10	0,85	0,86	1,00	0,75	0,58	0,83	0,17	0,51	0,66	0,57	0,56	0,99	N			12	0,08	0,02	0,05	0,02	0,02	0,00	0,04	0,08	0,04	0,02	0,12	0,10
4	11	1,00	0,85	0,85	1,00	0,59	0,59	0,68	0,49	0,17	0,83	0,57	0,74		N		12	0,08	0,02	0,05	0,02	0,02	0,00	0,04	0,08	0,04	0,02	0,12	0,10
6	12	0,85	0,71	0,86	0,75	0,99	0,75	0,49	0,00	0,00	0,74	0,59	0,99			N	12	0,06	0,03	0,02	0,06	0,03	0,02	0,06	0,03	0,02	0,10	0,08	0,08

Abb. 5-18: Verknüpfung der Kopplungsmatrizen zur Identifikation der aktiven Quergleitkopplung L2n6 für die Zwillingsbeziehung AB (Korn 29 und 28 in Probe P3)

Eine Visualisierung dieses konkreten Beispiels veranschaulicht die beiden für den Quergleitprozess (Fall 1) wesentlichen geometrischen Voraussetzungen. Das Berühren zweier aktiver Gleitebenen in einer in der (Zwillings-)Korngrenze liegenden Tetraederkante, sowie die Aktivität des zu beiden Gleitebenen gehörenden Gleitrichtungsvektors.

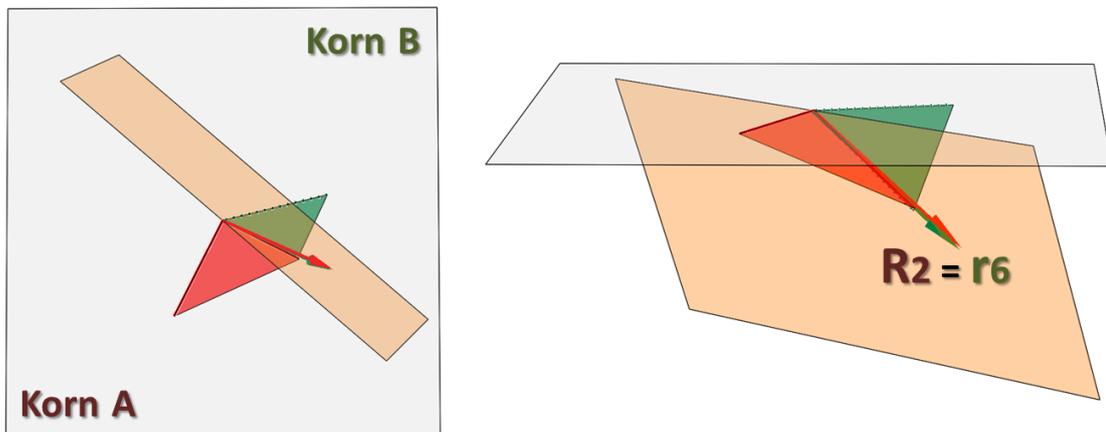


Abb. 5-19: 3D-Visualisierung der Quergleitkopplung mit den beteiligten und identischen Burgersvektoren  $R_2$  und  $r_6$ , sowie den beteiligten Gleitebenen  $L$  (rot) und  $n$  (grün). (links) Draufsicht auf die Probenoberfläche (transparent) mit Blick in die Tiefe, (rechts) Variation der Perspektive zur besseren Erfassung der Gleitebenenschnitte auf der Korngrenze

### 5.2.2 Fall 2: Gleitung parallel zur Zwillings ebene

Eine zweite Gleitsystemkopplungsvariante (Fall 2) beschreibt den Fall, dass keine der drei möglichen geometrisch passenden Gleitsystemkopplungen eine nennenswerte Aktivität aufzeigen, sondern die Schmidfaktoren der in der gemeinsamen Zwillings ebene liegenden Gleitsysteme am stärksten ausfallen, wie das nachfolgend gezeigte Beispiel, der Zwillingsbeziehung C-D, veranschaulichen soll.

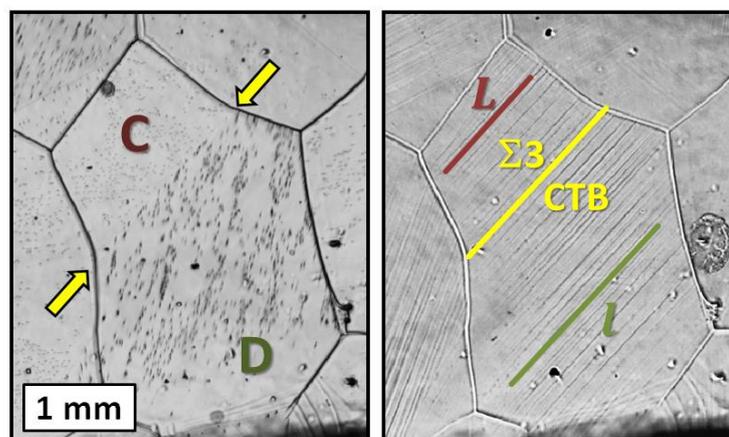


Abb. 5-20: Die hauptaktive Gleitung (Gleitlinien im rechten Bild) erfolgt auf den (Zwillings-)Ebenen, die parallel zur Zwillingskorngrenze (gelb) verlaufen - (Korn 35 und 38) in Probe P2

GB $\Sigma 3$ - CD $\omega_{ij}$ <span style="float: right;"><math>\delta</math> 48 <math>\varepsilon</math> 117</span>														
E\e	R\l r	k			l			m			n			
		2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6	
		i\j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
K	2	1	0,74	0,74	1,00	0,54	0,53	0,07	0,51	0,49	0,00	0,75	0,74	1,00
	3	2	1,00	0,57	0,57	0,99	0,54	0,54	0,66	0,17	0,51	0,83	0,75	0,57
	6	3	0,74	0,83	0,57	0,53	1,00	0,53	0,17	0,49	0,49	0,57	1,00	0,58
L	2	4	0,56	0,55	0,95	0,51	0,50	0,01	0,58	0,58	0,01	0,02	0,02	0,00
	4	5	0,12	0,56	0,56	0,01	0,51	0,50	0,01	0,01	0,01	0,10	0,12	0,02
	5	6	0,56	1,00	0,56	0,50	0,01	0,51	0,58	0,01	0,01	0,18	0,19	0,01
M	1	7	0,75	0,58	0,83	0,94	0,94	1,00	0,59	0,59	1,00	0,16	0,50	0,67
	3	8	1,00	0,58	0,57	1,00	0,94	0,94	0,83	0,59	0,76	0,66	0,50	0,16
	5	9	0,74	1,00	0,74	0,94	0,88	0,94	0,76	1,00	0,76	0,50	0,00	0,50
N	1	10	0,50	0,17	0,67	0,61	0,61	1,00	0,59	0,59	1,00	0,59	0,75	0,84
	4	11	0,00	0,49	0,51	0,22	0,61	0,61	1,00	0,75	0,75	1,00	0,76	0,76
	6	12	0,50	0,67	0,17	0,61	1,00	0,60	0,59	0,84	0,75	0,59	1,00	0,59

GB $\Sigma 3$ - CD SFK $ij$														
E\e	R\l r	k			l			m			n			
		2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6	
		i\j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
K	2	1	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
	3	2	0,05	0,03	0,08	0,16	0,18	0,01	0,10	0,12	0,02	0,01	0,03	0,04
	6	3	0,05	0,02	0,07	0,15	0,16	0,01	0,09	0,11	0,02	0,01	0,03	0,04
L	2	4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,00
	4	5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10	0,12	0,02
	5	6	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,13	0,02
M	1	7	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
	3	8	0,05	0,03	0,08	0,16	0,18	0,01	0,10	0,12	0,02	0,01	0,03	0,04
	5	9	0,05	0,02	0,07	0,15	0,16	0,01	0,09	0,11	0,02	0,01	0,03	0,04
N	1	10	0,01	0,00	0,01	0,02	0,02	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
	4	11	0,05	0,03	0,08	0,16	0,18	0,01	0,10	0,12	0,02	0,01	0,03	0,04
	6	12	0,06	0,03	0,09	0,18	0,19	0,01	0,11	0,13	0,02	0,01	0,04	0,05

Abb. 5-21: Die hauptaktiven Schmidfaktorkopplungen fallen teilweise mit geometrisch ungünstigen Passungen zusammen, aber auch mit der Zwillingsebene selbst, was die Gleitung parallel und entlang dieser beiden gemeinsamen Ebene erklärt. Die drei außerhalb der Zwillingsebene liegenden (Quergleit-)Kopplungen bleiben inaktiv

Die gemeinsame Betrachtung von Gleitsystem- und Schmidfaktor-Kopplungsmatrix zeigt für diesen Fall 2 deutlich, dass die einzigen – gleichsam geometrisch passenden, wie aktiven – Gleitsystemkombinationen der Zwillingsebene zuzuordnen sind. Die Konsequenz dieser Konstellation zeigt sich bei der Analyse der in den benachbarten Körnern, C und D, auftretenden Gleitung. Zwei der drei in der gemeinsamen Symmetrieebene liegenden Gleitsysteme sind aktiv mit der Folge, dass beide Körner, links und rechts von der Korngrenze, parallel zu dieser abgleiten können. Beide Körner sind also in der Lage sich mehr oder minder gleichsinnig zu verformen, ohne dass die Korngrenze selbst, aufgrund ihrer relativen Lage, eine Barrierewirkung entfalten kann.

Nach dem sich in den beiden ersten Fallunterscheidungen die Beurteilung der potentiellen Gleitsystempassung an deren Gleitaktivität orientierte, kehrt sich diese Logik im dritten Betrachtungsfall um. Hier erfolgt zuerst die Betrachtung welche Gleitsysteme tatsächlich für eine Aktivität in Frage kommen und erst daran anknüpfend die Frage, wie deren Passungen zueinander ausfallen. Ein besondere Konstellation, Fall 3, liegt vor, wenn zwei benachbarte Gleitsysteme ( $i, j$ ) hauptaktiv sind, gleichzeitig jedoch maximal zueinander fehlorientiert sind.

### 5.2.3 Fall 3: Gleitungsinkompatibilität in der Zwillingskorngrenze

Dieser Fall 3 wird durch die in Abb. 5-22 dargestellte Zwillingbeziehung E-F repräsentiert. Die in beiden Körnern jeweils dominanten Gleitlinien treffen auf der Zwillingskorngrenze (hellrote Linie) aufeinander, jedoch – genau anders wie in Fall 1 – ohne die Möglichkeit der Gleittransmission. Der Unterschied zu Fall 1 liegt begründet in der geometrischen Konstellation der beteiligten Gleitebenen zueinander und bezogen auf die Korngrenzebene.

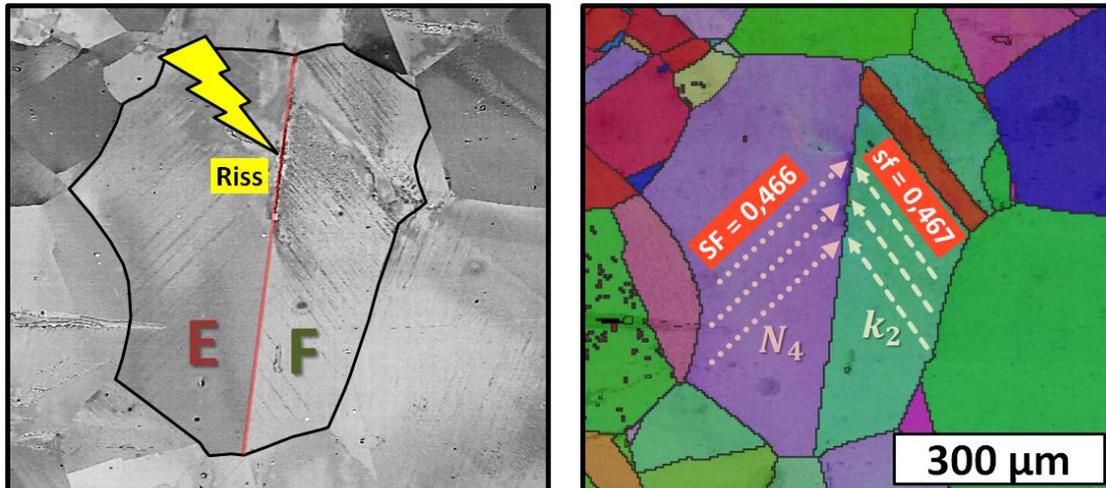


Abb. 5-22: Zwei links- und rechtsseitig der Zwillingkorngrenze hauptaktive und gleichzeitig geometrisch äußerst unpassende Gleitsysteme treffen auf der Korngrenzebene aufeinander, mit der Folge der Initiierung eines Ermüdungsrisses - (Korn 35 und 38) in Probe PW

Um diese „Nicht-Passung“ sichtbar zu machen bietet sich abermals eine dreidimensionale Visualisierung der geometrischen Gegebenheiten an, wie sie in der folgenden Abbildung dargestellt ist.

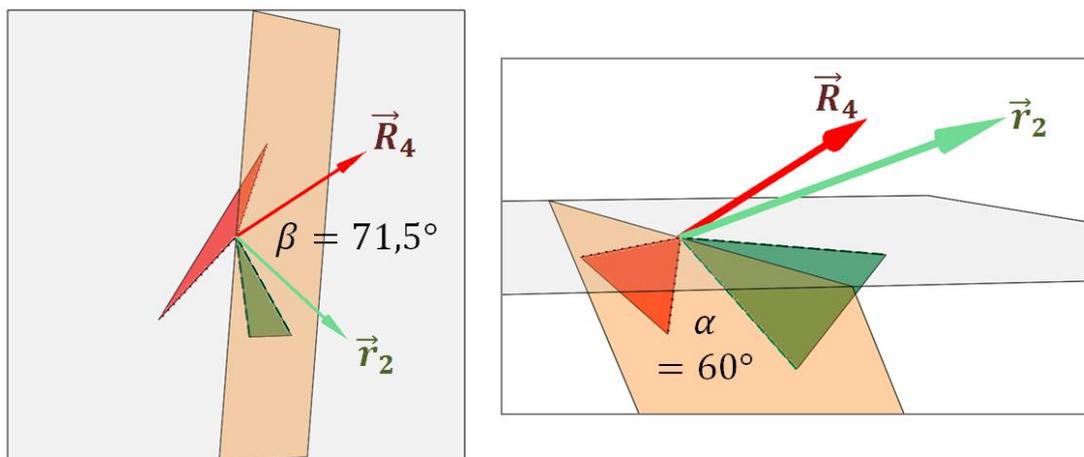


Abb. 5-23: 3D-Visualisierung der in Abb. 5-22 gezeigten Gleitsystemkopplung N4k2

Der linke Teil der Abb. 5-23 entspricht wiederum einer Draufsicht auf die Oberfläche. Jedoch erlaubt deren Transparenz einen Blick auf die darunter liegenden Verhältnisse, welche direkt zu erkennen geben, dass sich die beiden koppelnden Gleitebenen nur in einem Punkt berühren und nicht in einer gemeinsamen Kante. Das Gegenteil ist der Fall, denn die zwei Ebenen schneiden die Korngrenze in zwei unterschiedlichen Kanten, was zu einem (für Zwillingbeziehungen) maximalen Schnittwinkel von  $\alpha = 60^\circ$  führt.

Des Weiteren liegen auch die beteiligten Gleitrichtungen mit einem Winkel von  $\beta = 71,5^\circ$  deutlich auseinander, was zusammengerechnet einen Gleitsystemkoppplungswiderstand von 0,841 ergibt. Da bei der in diesem Fall vorliegenden und konkreten Gleitsystemkoppelung N4-k2 somit jedwede Gleittransferprozesse auszuschließen sind, bleibt zu prüfen, ob mögliche andere Gleitsystemkombinationen in Frage kommen, um ein eventuelles Passieren der Korngrenze zu erlauben. Hierzu ist wieder die gemeinsame Betrachtung von Gleitsystem- und Schmidfaktorkopplungsmatrix vonnöten.

GB $\Sigma 3$ - EF $\omega_{ij}$													$\delta$ 86	$\varepsilon$ 72	GB $\Sigma 3$ - EFSFK $ij$													
E\ e	R\ r	k			l			m			n			R\ r	i\ j	k			l			m			n			
		2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6			2	3	6	2	4	5	1	3	5	1	4	6	
K	2	1	0,57	0,56	0,14	0,57	0,58	0,99	0,97	0,97	1,00	0,49	0,5	0,01	2	1	0,05	0,04	0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,02	0,04	0,03	0,01
	3	2	0,97	0,55	0,58	0,97	0,55	0,58	0,95	0,97	0,97	0,01	0,49	0,52	3	1	0,07	0,06	0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,03	0,06	0,04	0,02
	6	3	0,54	0,99	0,56	0,54	0,13	0,59	0,97	1,00	0,98	0,52	0,01	0,49	6	3	0,11	0,09	0,02	0,00	0,00	0,00	0,02	0,03	0,05	0,09	0,06	0,03
L	2	4	0,51	0,49	0,00	0,74	0,75	1,00	0,72	0,73	1,00	0,52	0,55	0,07	2	4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	4	5	0,68	0,18	0,50	0,84	0,73	0,57	0,99	0,56	0,55	0,99	0,52	0,53	4	5	0,02	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	0,00
	5	6	0,19	0,68	0,50	0,58	0,98	0,56	0,72	0,83	0,55	0,51	0,97	0,54	5	6	0,02	0,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,90	0,01	0,01	0,02	0,01	0,00
M	1	7	0,60	0,60	1,00	0,56	0,75	0,81	0,53	0,17	0,64	0,95	0,95	1,00	1	7	0,09	0,08	0,02	0,00	0,00	0,00	0,02	0,02	0,04	0,08	0,05	0,02
	3	8	0,98	0,75	0,77	0,98	0,73	0,75	0,00	0,48	0,52	0,90	0,95	0,95	3	8	0,07	0,06	0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,03	0,06	0,04	0,02
	5	9	0,61	0,85	0,76	0,58	0,98	0,56	0,47	0,68	0,16	0,95	1,00	0,95	5	9	0,16	0,14	0,03	0,00	0,00	0,00	0,03	0,04	0,07	0,13	0,09	0,04
N	1	10	0,59	0,6	0,00	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	10	1	0,15	0,12	0,03	0,00	0,00	0,00	0,03	0,04	0,06	0,12	0,08	0,03
	4	11	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	0,85	4	11	0,22	0,18	0,04	0,00	0,00	0,01	0,04	0,05	0,09	0,17	0,12	0,05	
	6	12	0,75	0,8	0,8	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	6	12	0,07	0,06	0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,03	0,06	0,04	0,02	

Abb. 5-24: Die Gleitsystemkoppelung N4k2 weist mit einem Wert von 0,22 die höchste Schmidfaktorkopplung bei gleichzeitig äußerst ungünstiger Passung (0,85) auf

Die Gleitsystemkoppelung mit dem höchsten Schmidfaktorkopplungsfaktor mit einem Wert von 0,22 findet sich für die Kombination  $i = 11, j = 1$  (also N4 mit k2). Dem gegenüber steht jedoch ein Gleitsystemkoppelungswiderstand von  $\omega_{11,1} = 0,85$ , woraus eine deutliche Barrierewirkung der Zwillingskorngrenze in dieser geometrischen Konstellation resultiert. Ein weiterer Vergleich ergibt, dass die potentiellen Quergleitkoppelungen gänzlich inaktiv bleiben, lediglich eine Gleitsystemkoppelung ( $i = 2, j = 10$ ) innerhalb der Zwillings ebene weist mit einem SFK-Wert von 0,13 eine tendenziell weitere Möglichkeit für einen gemeinsamen Gleitprozess aus.

Bezogen auf die unterschiedlich starke Ausprägung der Aktivitäten steht dabei zunächst jedoch der Blockierungseffekt der Korngrenze im Vordergrund. Anders als in Fall 1 ist hier kein gegenseitiges Passieren von Gleitung möglich, weshalb es in Fall 3 zu einem beidseitigem Aufstau der von links und rechts ankommenden Versetzungen kommen muss. Bei immer wiederkehrender Belastung, wie sie im Ermüdungsfall vorliegt, wird der Stau zyklisch verstärkt, bis die daraus resultierenden lokalen Spannungsüberhöhungen zur Materialschädigung, hier dem Aufreißen der Korngrenze führen.

Selbst wenn man die theoretische Möglichkeit eines Transmissionsprozesses in Betracht zöge, würden die damit einhergehenden Versetzungsreaktionen ebenfalls ein Aufreißen begründen. Denn aufgrund der geometrischen Inkompatibilität in dieser Konstellation

(Fall 3) würden die bei den Reaktionen entstehenden Restburgersvektoren betragsmäßig groß ausfallen und hätten überdies eine deutliche Richtungskomponente außerhalb der Zwillingssebene, was ebenfalls zu lokalen Dehnungs- und Spannungsinhomogenitäten mit den beschriebenen Folgen führen würde.

Unabhängig davon wie die tatsächlichen Versetzungsmechanismen in Wirklichkeit ablaufen, ist das geometrische Modell im Rahmen der *STRONG*-Methode imstande den Blockierungscharakter der Korngrenze (wohlgemerkt – immer bezogen auf die individuelle Gleitsystemkopplung) in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden zu beschreiben.

Zusammenfassend lässt sich als Ergebnis festhalten, dass zwar die grundsätzliche Geometrie einer Zwillingsbeziehung bei Vorliegen einer kohärenten Zwillingskorngrenze für alle Fälle identisch ist, die entscheidende Frage jedoch darin liegt, welche konkreten Gleitsystemkopplungen infolge der gegebenen Belastungssituation tatsächlich miteinander in Interaktion treten. D.h. die Lage des Zwillings bezogen auf die Hauptbelastungsrichtung entscheidet letztlich über deren Charakter im Sinne ihrer Blockierungs- oder Transmissionswirkung. Je nach Ausprägung der Verteilung der jeweiligen Schmidfaktorbeiträge auf die einzelnen Gleitsysteme kann man sich die tatsächlich vorliegende geometrische Gesamt-Kopplung auch als Überlagerung der drei beschriebenen Extremfälle vorstellen. So ist davon auszugehen, dass die in obigem Beispiel zunächst vernachlässigte zweite möglicherweise relevante Kopplung ( $i = 2, j = 10$  – gemeinsame Gleitung entlang der Zwillingssebene) ebenfalls einen Beitrag zur Schädigung, insbesondere zu dem Aufreißen der Korngrenze leistet. Welcher Effekt schließlich dominiert, hängt dann mit der anteiligen Gewichtung zwischen den einzelnen Spezialfällen zusammen.

### 5.2.4 Klassifizierung der Zwillingskorngrenzen

Eine gemeinsame verknüpfende Analyse von Gleitsystemkopplungsmatrix und den korrespondierenden Schmidfaktorverteilungen soll trotz der Möglichkeit von Mischfällen eine Klassifizierung nach dem jeweils dominierenden Effekt zulassen: Quergleitung, Gleitung parallel zur Zwillingskorngrenze oder blockierte Gleitung. Die folgende Abbildung veranschaulicht die für die drei unterschiedlichen Fälle jeweils relevanten Geometrien.

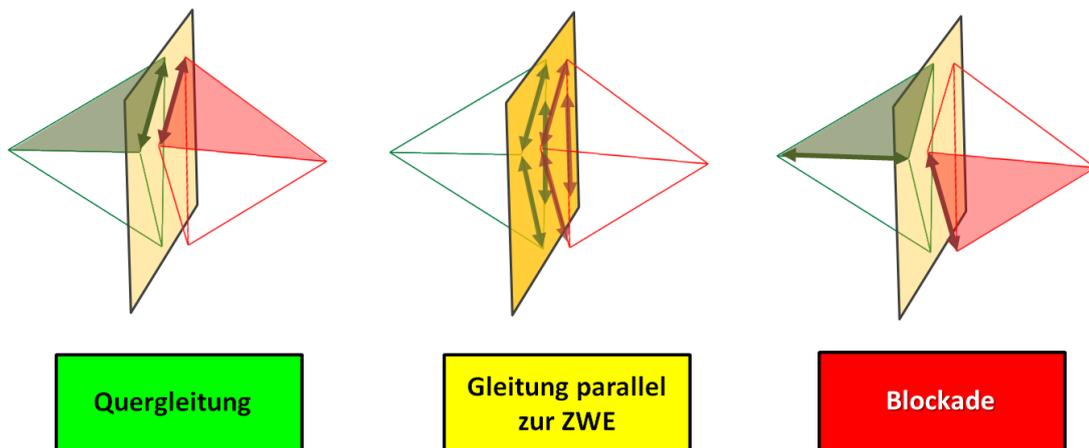


Abb. 5-25: Schematische Einteilung und Visualisierung der drei grundsätzlichen Kopplungsarten: Fall 1 Quergleitung, Fall 2 Gleitung parallel zur Zwillingskorngrenze und Fall 3 Gleitsystemkopplung zweier nichtpassender Gleitsysteme (Blockade)

Ziel dieser Klassifizierung soll es sein, ähnlich dem in dieser Arbeit entwickelten Fehlpassungs-Mapping, eine dezidierte Beurteilung der Schädigungstendenz von Zwillingskorngrenzen zu erlauben. Hiermit verbunden sind gleich mehrere aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen. Allen voran die bereits im Grundlagenteil angerissene Frage, ob Zwillingskorngrenzen Schädigungsmechanismen, wie u.a. die Rissentstehung, in einem Gefüge eher begünstigen oder – im Gegenteil – tendenziell erschweren. Ebenso die Frage welche Gleitmechanismen es im Detail sind, die eine Schädigung verursachen: Die Transmission, das Blockieren oder weitere andere Effekte?

Ausgehend von dem realen Gefüge der nachfolgend abgebildeten Ermüdungsprobe (Probe PW-Ni011), soll eine beispielhafte Kategorisierung der in dem schwarz umrandeten Gefügausschnitt liegenden Zwillingskorngrenzen durchgeführt werden.

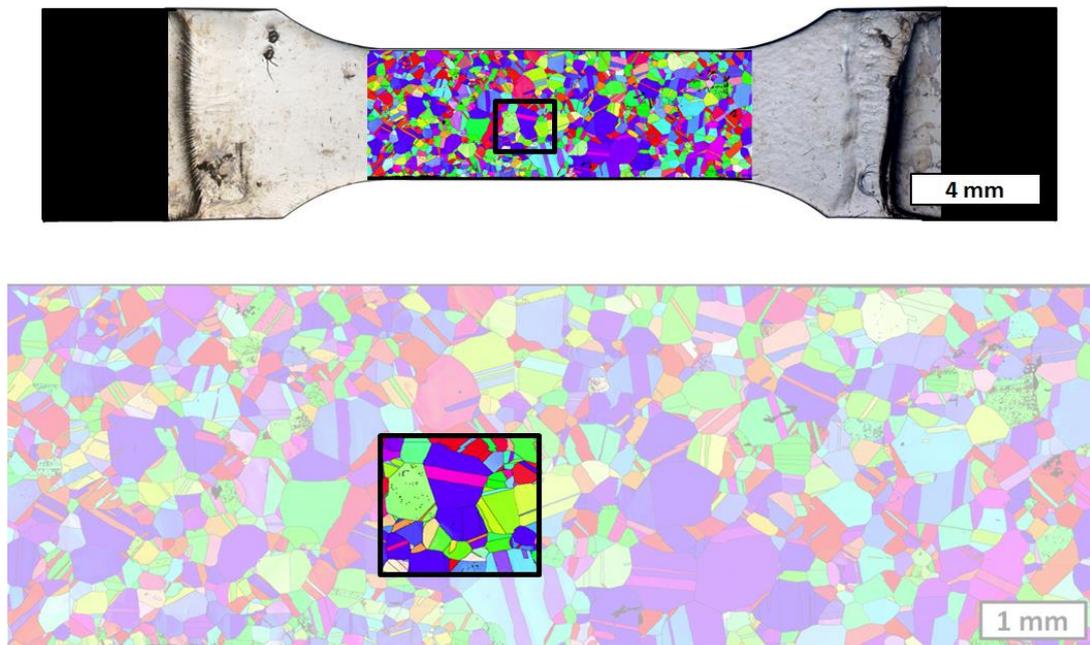


Abb. 5-26: (oben) Lichtmikroskopisches Stitch-Bild der gesamten Probenoberfläche inklusive EBSD-Mapping des Stegbereichs, (unten) Einschränkung des Betrachtungsbereiches

Die nachstehende Abb. 5-27 zeigt zum einen ein „Schmidfaktor-Mapping“ (links), welches mittels Farbcodierung (grün-gelb-rot) Auskunft über den jeweils pro Korn maximalen Schmidfaktor gibt und zum anderen (rechts) ein Korngrenzen-Mapping inklusive farblicher Markierung der CSL- $\Sigma$ -Beziehungen.

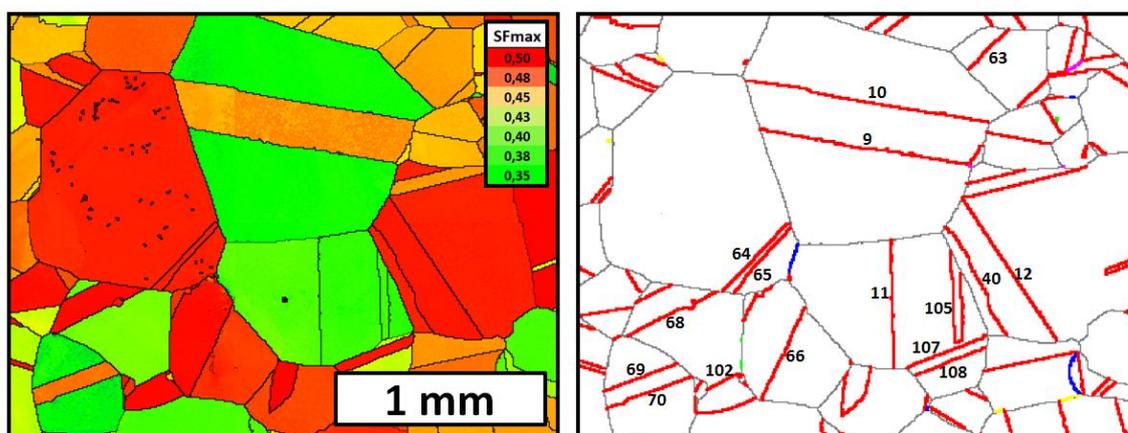


Abb. 5-27: (links) Charakterisierung des Bildausschnitts aus Abb. 5-26 hinsichtlich der potentiellen Gleitaktivität basierend auf einem Mapping der (pro Korn maximalen) Schmidfaktoren und (rechts) Identifikation der CSL- $\Sigma$ -Beziehungen (Zwillinge rot)

Im Sinne einer besseren Vergleichbarkeit werden nicht alle Zwillingskorngrenzen dem Versuch einer Klassifizierung unterzogen, sondern maßgeblich nur solche, die vollständig im Bildbereich liegen, über eine Mindestgröße, sowie einen näherungsweise geraden Verlauf verfügen. Die gemäß diesen Einschränkungen sechzehn nummerierten und somit in Betracht kommenden Nachbarschaftsverhältnisse können nun wiederum mithilfe der *STRONG*-Methode hinsichtlich ihrer Präferenz bezüglich einer der drei möglichen Kategorien überprüft werden. Hierzu werden die zu den jeweils drei maximalen Schmidfaktorkopplungen korrespondierenden Gleitsystemkopplungswerte untersucht und im Falle einer vorliegenden geometrischen Passung zwischen Quergleitung und Korngrenzengleitung differenziert, oder aber, wenn keine Passungen vorliegen, der damit einhergehende Blockierungscharakter attestiert. Das Ergebnis dieser Einteilung ist in der Tabelle in nachstehender Abbildung aufgeführt. Das Ziel einer Visualisierung in Form eines Korngrenzen-Mappings, welches den gemäß der angewandten Klassifizierung individuellen Charakter der untersuchten Zwillingskorngrenzen zur Geltung bringen soll, liefert die nebenstehende Gefüge-Map.

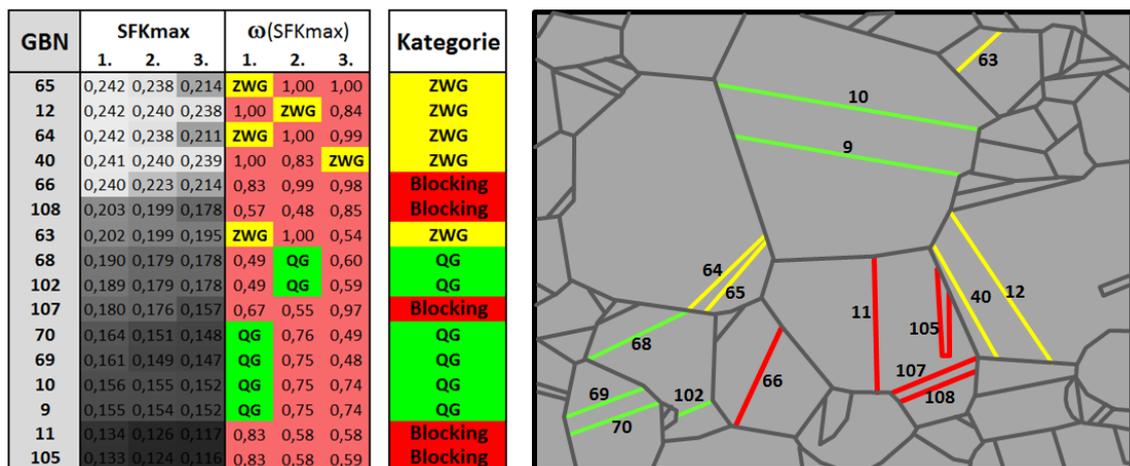


Abb. 5-28: (links) Kategorisierung der einzelnen Zwillingskorngrenzen bezüglich deren jeweils dominierenden Kopplungscharakters mit nebenstehender farblicher Visualisierung im Gefüge

Die gelb linierten Zwillingsgrenzen markieren die Präferenz für Fall 2, also einem hohen Gleitanteil parallel zur gemeinsamen Zwillingskorngrenzenebene. Die grünen Linien identifizieren jene Zwillinge bei denen die Quergleitung potentiell zum Tragen kommt. Diesen beiden Kategorien – Fall 2, Parallelgleitung und Fall 1, Quergleitung – gehören 11 der 16 untersuchten Zwillinge an. Die verbleibenden fünf Nachbarschaftsverhältnisse zeichnen sich dadurch aus, dass keine Passungen für die aktiven Kopplungen vorliegen (Fall 3). Der Blockierungscharakter dieser Grenzen wird durch die roten Linien zum Ausdruck gebracht. Da jedoch davon auszugehen ist, dass die Blockierungswirkung umso gewichtiger ist, je größer die „an der Korngrenze anliegende“ Aktivität ausfällt, kann eine entsprechende Gewichtung, wie sie in Tabelle 5-2 angestellt

wird, eine detailliertere Untereinteilung des Blockierungscharakters bewirken. Die denkbar maximale Blockierungswirkung würde sich theoretisch bei einem maximalen Schmidfaktorkopplungswert von 0,25 (d.h. beide koppelnde Gleitsysteme haben einen Schmidfaktor von jeweils 0,5), sowie einem Gleitsystemkopplungswiderstand von  $\omega = 1$  ergeben. Basierend auf dieser Annahme lässt sich gemäß Formel (54) eine neue Größe einführen, ein Korngrenzenwiderstand  $\Omega$ , welcher auch die vorherrschenden Gleitsystemaktivitäten berücksichtigt.

$$\Omega = 4 \cdot SFK \cdot \omega \quad (54)$$

Diese Definition als Produkt aus Schmidfaktorkopplung und geometrischem Kopplungswiderstand, soll u.a. zum Ausdruck bringen, dass beispielsweise eine Korngrenze (bezogen auf die betrachtete Gleitsystemkopplung) auch mit einem großen Wert für  $\omega$ , bei nur geringer oder gar keiner herrschenden Gleitsystemaktivität letztlich ihre durch  $\omega$  begründete Blockierungswirkung nicht entfalten kann. Der Vorfaktor 4 soll lediglich die Normierung auf 1 bewirken (da  $SFK$  maximal ja nur 0,25 werden kann). Wendet man dieses Konzept auf die fünf in Abb. 5-28 als blockierend eingestuftes Zwillingskorn-grenzen an, so erhält man folgende Zahlenwerte:

GBN	SFKmax			$\omega(SFKmax)$			$\Omega(SFKmax)$			$\Omega_{mittel}$	Skala
	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.		
66	0,240	0,223	0,214	0,83	0,99	0,98	0,8	0,9	0,8	0,84	1,0
108	0,203	0,199	0,178	0,57	0,48	0,85	0,5	0,4	0,6	0,49	0,9
107	0,180	0,176	0,157	0,67	0,55	0,97	0,5	0,4	0,6	0,49	0,8
11	0,134	0,126	0,117	0,83	0,58	0,58	0,4	0,3	0,3	0,34	0,7
105	0,133	0,124	0,116	0,83	0,58	0,59	0,4	0,3	0,3	0,33	0,6
											0,5

Tabelle 5-2: Ermittlung des Korngrenzenwiderstandes  $\Omega$  in Abhängigkeit der SFK-Aktivität

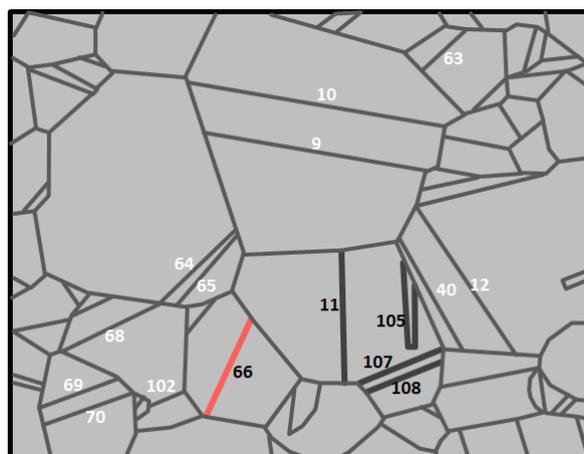


Abb. 5-29: Visualisierung der  $\Omega$ -Einteilung (vgl. Tabelle 5-2) in der Gefüge Map. Korngrenze 66 entfaltet infolge der hohen Gleitsystemaktivität den größten Barriere-Effekt.

Welche Konsequenz eine solche Konstellation, wie sie für die Zwillingskorngrenze 66 vorliegt, im konkreten Anwendungsfall, wie beispielsweise bei einem Ermüdungsversuch, zur Folge haben kann, vermittelt ein Blick auf die lokale Oberflächenstruktur in der Nähe der Korngrenze, wie in der folgenden Abbildung geschehen.

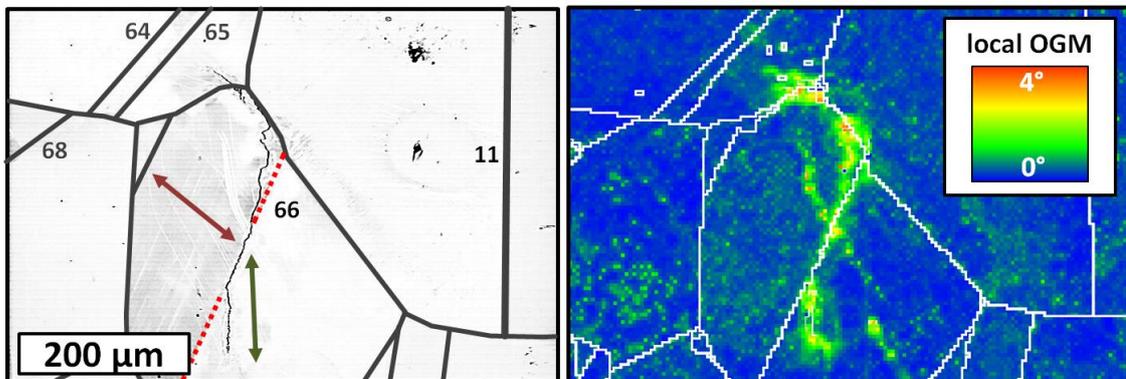


Abb. 5-30: Initiierung eines Ermüdungsrisses an der Korngrenze 66 infolge der starken Ausprägung der Blockierungswirkung aufgrund der intensiven Gleitsystemaktivität

Während es in der Umgebung der Zwillingskorngrenzen 64, 65, 68 und 11 zu keinen erkennbaren Schädigungsprozessen gekommen ist, sind bei der Betrachtung der Korngrenze 66 sowohl das Auftreten von Rissentstehung (entlang der Zwillingsgrenze), als auch Rissausbreitung (teilweise entlang der Zwillingsgrenze, aber auch in das Innere der beteiligten Körner) zu konstatieren. Der Rissverlauf wird ebenfalls erkennbar in der rechten Abbildung, welche den lokalen Gradient (OGM) der Orientierungsdaten farblich darstellt. Da für beide Mechanismen, Rissentstehung und -ausbreitung, mitunter die Akkumulation von Versetzungen ursächlich ist, ist die damit verbundene lokale Verdrehung bzw. Verzerrung des Kristallgitters ein Indiz für das Auftreten von Schädigung. Umgekehrt spricht der homogenen blauen Farbverlauf in unmittelbarer Umgebung der anderen Korngrenzen dafür, dass dort bislang noch keine lokalen Schädigungsmechanismen in Erscheinung getreten sind.

In wieweit die auf Grundlage der *STRONG*-Berechnungsmethode ermittelte Einteilung von Zwillingskorngrenzen nun herangezogen werden kann, um Aussagen bezüglich der lokalen Schädigungstendenz eines untersuchten Gefügebereichs abzuleiten, wird u.a. Gegenstand der Diskussion sein. Ebenso die damit verbundene kritische Auseinandersetzung mit der Frage, wo die Grenzen bzw. Übergänge zwischen den drei eingeführten Klassen liegen, sowie der Frage ab welcher Intensität die in dieser Arbeit verwendete Begrifflichkeit der Gleitsystemaktivität zu tatsächlicher Schädigung führt und welchen Einfluss deren Verteilung auf die verschiedenen Gleitsysteme und Kopplungen hat. Trotz diesen genannten und sicherlich weiterer vieler Fragestellungen, wie dem Einfluss von Spannungsinhomogenitäten, von Verfestigungseffekten u.v.m., lässt sich im Er-

gebnis festhalten, dass die auf dem *STRONG*-Modell basierenden Betrachtungen und Berechnungen auf der Grundlage nur weniger Inputdaten (nämlich lediglich der Orientierungsdaten einer Zwillingsbeziehung und der Richtung der Belastung) im Stande sind, die tatsächlich und jeweils unterschiedlich auftretenden Gleitmechanismen in der Art ihrer Ausprägung zu beschreiben.

Der in diesem Abschnitt durchweg vorliegende Spezialfall der Zwillingsbeziehung führte dazu, dass die dreidimensionale Korngrenzenlage stets als bekannt vorausgesetzt werden konnte und die *STRONG*-Berechnungen somit vom Grundansatz keinerlei Annahmen, Näherungen oder Reduktionen bedurften. Auf diese Weise bestand der Ergebnisbereich für jedes einzelne Nachbarschaftsverhältnis „lediglich“ aus den konkreten 144 Gleitsystemkopplungswerten, verknüpft mit den 144 korrespondierenden Schmidfaktorkopplungswerten.

Da bei einer allgemeinen Nachbarschaftsbeziehung mitnichten von einer konstanten Korngrenzebene auszugehen ist, befasst sich der folgende Abschnitt gezielt mit der Frage, welchen Einfluss die dreidimensionale Lage der Korngrenze bei sonst gleichen Kornorientierungsparametern hat.

### 5.3 Transmissions-/Blockierungswirkung in Abhängigkeit der Korngrenzenorientierung

Um explizit den alleinigen Einfluss der Korngrenzenorientierung zu studieren ist die Konstruktion eines geometrischen Settings nötig, in dem alle anderen beteiligten Parameter konstant gehalten werden. Während diese Maßgabe kein Problem für eine rein theoretische Betrachtung darstellt, ist die experimentelle Realisierung einer solchen Konfiguration, wie sie durch die folgenden schematischen Abbildungen repräsentiert wird, ungleich schwerer.

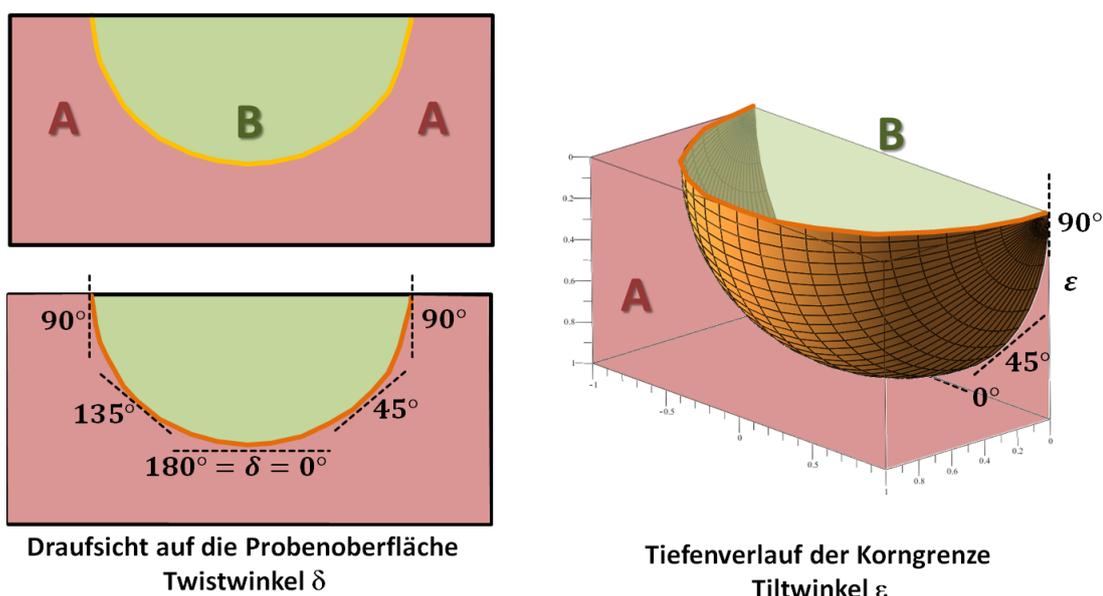


Abb. 5-31: Theoretisches Experiment einer halbseits eingeschlossenen Viertelkugel, um eine Korngrenzenfläche zu erzeugen, welche alle denkbaren Orientierungen beinhaltet

Die Gesamtkonstellation stellt sich wie folgt dar: Korn B ist so in einem Nachbarkorn A eingebettet, dass es von diesem gleichermaßen linksseitig und rechtsseitig berandet wird. Auf diese Weise durchläuft die als Halbkreis angenommene oberflächliche Korngrenzenlinie jede Krümmung zwischen  $\delta = 0^\circ \dots 180^\circ$ . Stellt man sich das Korn B – erweitert auf die dritte Dimension, also ins Probeninnere blickend – als Viertelkugel in Korn A liegend vor, so dann findet sich ebenfalls auch für jeden Neigungswinkel  $\epsilon = 0^\circ \dots 180^\circ$  ein entsprechender Punkt der Korngrenzenlinie in deren Tiefenverlauf. Mit einem so definierten Setting lässt sich das durch zwei konstante Kornorientierungen A und B vorgegebene Nachbarschaftsverhältnis mit jeder denkbaren Korngrenzenorientierung in Bezug bringen.

Ein reales Szenario, das diesem theoretischen Schema zumindest näherungsweise entspricht, liefert die folgend abgebildete Konfiguration, die sich dadurch auszeichnet, dass eine FIB-Kerbe künstlich in den Bereich zwischen zwei Dendritarmen in einer polykristallin abgegossenen Nickelbasis-Superlegierung (CMSX-4) eingebracht wurde.

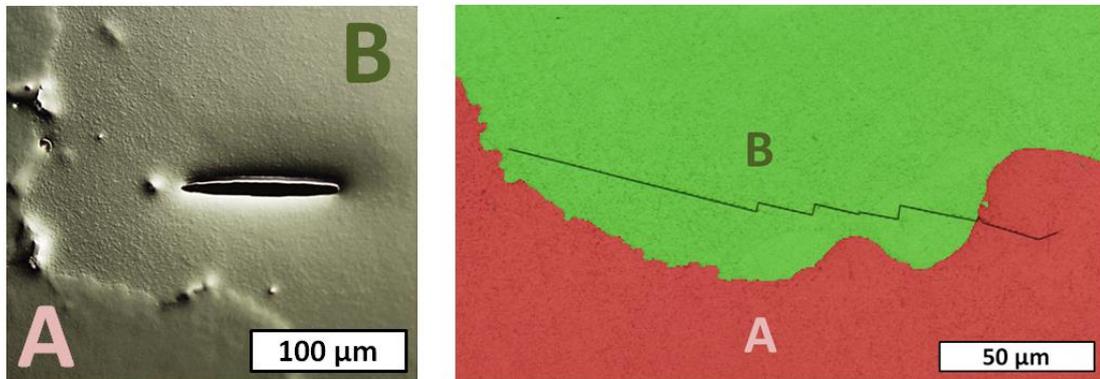


Abb. 5-32: (links) künstlich in die ursprüngliche Oberfläche eingebrachte FIB-Kerbe in definiertem Abstand vor einer Korngrenze, (rechts) Risspfad wie er sich nach einigem Oberflächenabtrag im Probeninnern zeigt (Probe P8)

Aufgrund dieser besonderen Positionierung wird der in Korn B verlaufende Riss beidseitig von ein und derselben Kristallorientierung (Korn A) begrenzt, so wie es das eingangs gewünschte Setting einer „Viertelkugel“ (vgl. Abb. 5-31) beschreibt. Alleine diese Konstellation würde bereits einen ersten Vergleich des Einflusses des oberflächlichen Korngrenzenverlaufs auf das Rissausbreitungsverhalten erlauben. Denn in der Tat wurde der Riss auf der linken Seite blockiert, während er die Korngrenze auf der rechten Seite passieren konnte, wie das rechte Bild in Abb. 5-32 zeigt. Um dieses unterschiedliche Verhalten jedoch mit dem Einfluss der Korngrenzenorientierung in Relation zu bringen, muss entweder eine grobe Abschätzung des Tiefenverlauf  $\varepsilon$  angestellt werden oder aber sogar eine experimentelle Bestimmung dieses Wertes. Da eine sinnvolle Näherung von  $\varepsilon$  aufgrund der dendritischen Gefügestruktur nur schwerlich möglich erscheint, ist ein „Blick“ unter die Probenoberfläche notwendig. Dieser könnte entweder lokal, also in einem deutlich kleineren Bereich als dem des gesamten Bildausschnitts, mittels einer FIB-Tomographie realisiert werden, oder – wie in diesem Falle geschehen – durch einen seriellen Abtrag der gesamten Oberfläche mittels Abschleifens, einem sogenannten Serial Sectioning Verfahren.

Diese sozusagen manuelle Tomographie ist deshalb von Vorteil, weil mit jedem Schleifschritt ein gesamter Oberflächenabtrag erfolgt, somit also der größtmögliche Bereich erfasst werden kann. Nachteilig ist jedoch die Tatsache, dass durch dieses händische Verfahren ein wohldefinierter Abtrag nur schwer einzuhalten ist, da die einzelnen Schleifschritte weder äquidistant, noch perfekt parallel erfolgen. Um dennoch einen

parallelen Abtrag zu gewährleisten und um den jeweiligen Tiefenabtrag bestimmen zu können, wird der zu tomographierende Probenbereich durch vier Indents abgegrenzt (vgl. Abb. 5-33 links). Anhand dieser „umgedrehten“ Pyramiden lässt sich die Schleiftiefe somit an vier Stellen kontrollieren. Gleichzeitig dienen die Indents als Bezugssystem für die Rekonstruktion der Informationen, die anhand der einzelnen Risspfade der jeweiligen Schliffbilder extrahiert werden. Auf diese Weise lässt sich ein dreidimensionales Modell, sowohl des Rissverlaufs, als auch der Korngrenze (zumindest abschnittsweise) nachbilden, wie Abb. 5-33 (rechts) zeigt.

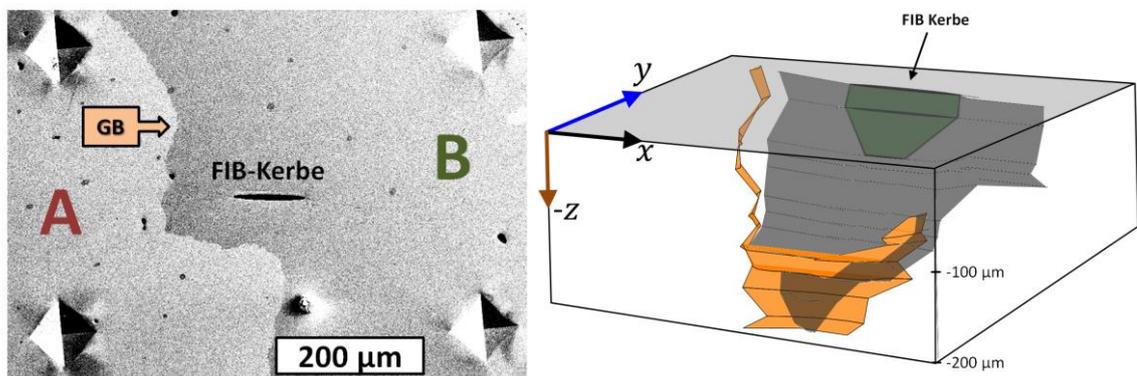


Abb. 5-33: (links) Absteckung des zu tomographierenden Bereichs um die FIB-Kerbe einschließlich des Risses (rechts) 3D-Rekonstruktion des Rissverlaufs im Probeninnern anhand der einzelnen Schnittbilder

Die Ausbreitungsgeschichte des betrachteten Risses kann wie folgt zusammengefasst werden: Ausgehend von einer 100 µm FIB-Kerbe (penny-shape Geometrie mit dem Radius 50 µm), die senkrecht zur Belastungsrichtung und mit einer Tiefenneigung in Richtung einer Gleitebene künstlich eingebracht wurde, setzte – bei anfänglich rein oberflächlicher Betrachtung – nach ca. 60.000 Zyklen (bei steigender Last bis 500 MPa) ein Ermüdungsrisswachstum in beiden Kerbspitzen ein. Während das Risswachstum linksseitig bedingt durch die Korngrenze zu Korn A nach einiger Zeit zum Erliegen kam, endete das rechtsseitige Wachstum ebenfalls, trotz scheinbar nicht vorhandenem Hindernis. Um das Vorliegen einer womöglich verborgenen Barriere, die eine solche Verlangsamung der Rissausbreitung erklären könnte, zu bestätigen, soll ein konsekutives Abtragen der Oberfläche Aufschluss geben. Die so zutage geförderten Ebenen parallel zur ursprünglichen Probenoberfläche erlauben in ihrer Gesamtschau zumindest näherungsweise eine ganzheitliche Beurteilung des Rissverlaufes in dessen dreidimensionaler Ausprägung, wie sie sich in Abb. 5-33 (rechts) und Abb. 5-34 darstellt. Eine geeignete Perspektive zur Darstellung der Wechselwirkung zwischen Riss und Korngrenze erlaubt die zweidimensionale Projektion des 3D-Modells auf die gedachte Probenseitenfläche, deren Normale in y-Richtung zeigt.



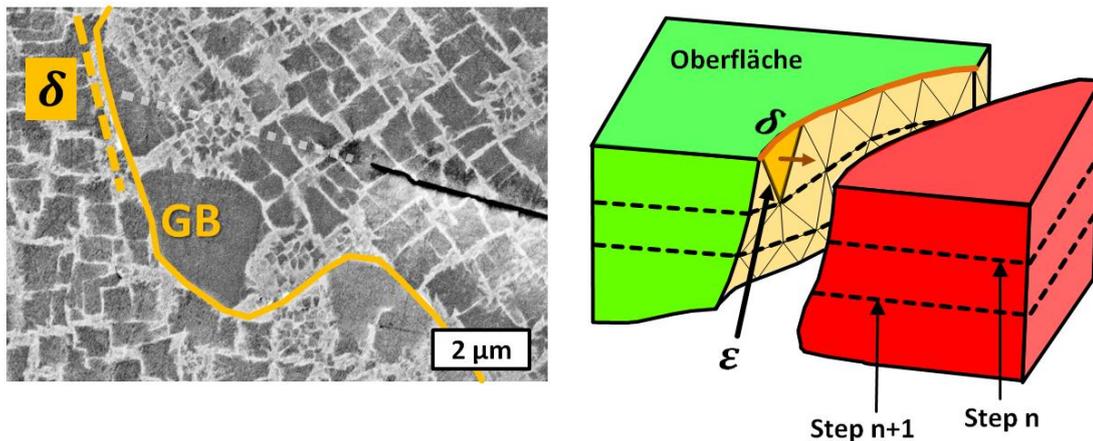


Abb. 5-35: Schematische Darstellung des Rekonstruktionsprinzips zur Bestimmung der Korngrenzenparameter  $\delta$  und  $\varepsilon$

Die auf diese Weise erlangten 15 konkreten  $(\delta, \varepsilon)$ -Parameterpaare, welche in Näherung die jeweilige Korngrenzenlage definieren, können nun mittels der *STRONG*-Methode einzeln ausgewertet werden. Da nicht nur das Nachbarschaftsverhältnis AB für alle Fälle identisch ist, sondern durch den tomographierten Rissverlauf bereits identifiziert werden konnte, dass der Risstransfer – an den Stellen wo er denn auftritt – von der geometrisch am besten passendsten Gleitsystemkopplung getragen wird, können bei der folgenden Betrachtung alle anderen, schlechter passenden Kopplungen, zunächst außen vor bleiben. Um nun zu einer Beurteilung der einzelnen Barriere- bzw. Transmissionswirkung der 15 unterschiedlichen Korngrenzenkonfigurationen zu gelangen, können die jeweils zu den  $(\delta, \varepsilon)$ -Parameterpaaren korrespondierenden Funktionswerte der relevanten Gleitsystemkopplungsmatrix(-Kachel) ausgelesen werden.

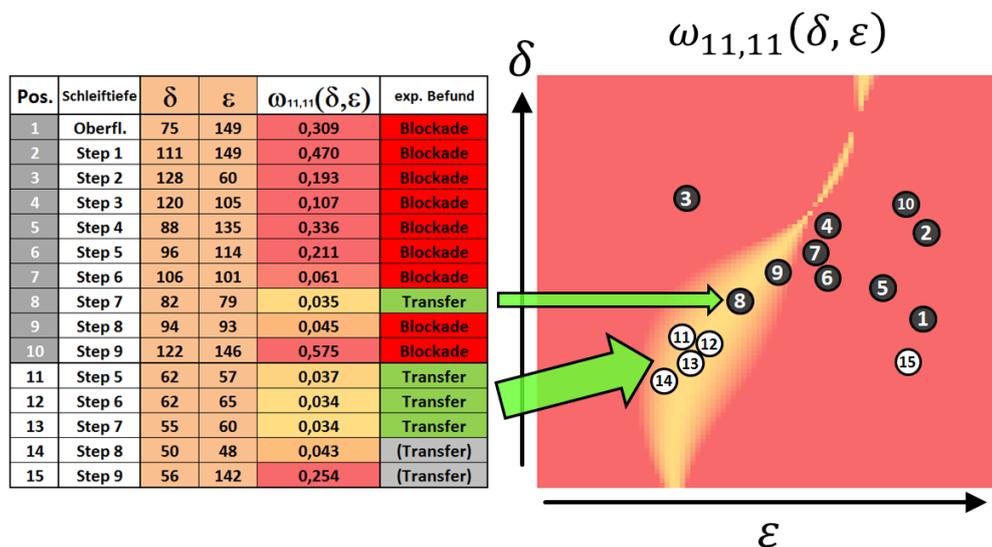


Abb. 5-36: Vergleich des tatsächlich auftretenden Transmissions- bzw. Blockierungsverhaltens mit den berechneten Widerstandswerten  $\omega(\delta, \varepsilon)$

Die zum linksseitigen Risswachstum gehörenden Wechselwirkungsstellen (1 bis 10) liegen bis auf zwei Konfigurationen (8 und 9) allesamt im „roten“ Bereich der farbco-dierte Kachel. Der Grenzwertbedingung der *STRONG*-Berechnung folgend, bedeutet dies, dass bei diesen Konfigurationen die Barrierewirkung dominiert. Während die Korngrenzenlage mit der Nummer 9 gerade im Grenzwertbereich (Übergang rot-gelb) liegt und im Experiment als Barriere wirkt, deutet sich bei der Konfiguration Nr. 8 mit einem Korngrenzenwiderstand von 0,035 die Tendenz für ein Transmissionsverhalten an. Und in der Tat zeigt sich bei einer hochauflösenden REM-Abbildung, dass der Riss von Korn B kommend, die Korngrenze minimal passiert und etwa über eine Länge von lediglich knapp 200 nm in das Korn A ragt, wie Abb. 5-37 (links) zeigt.

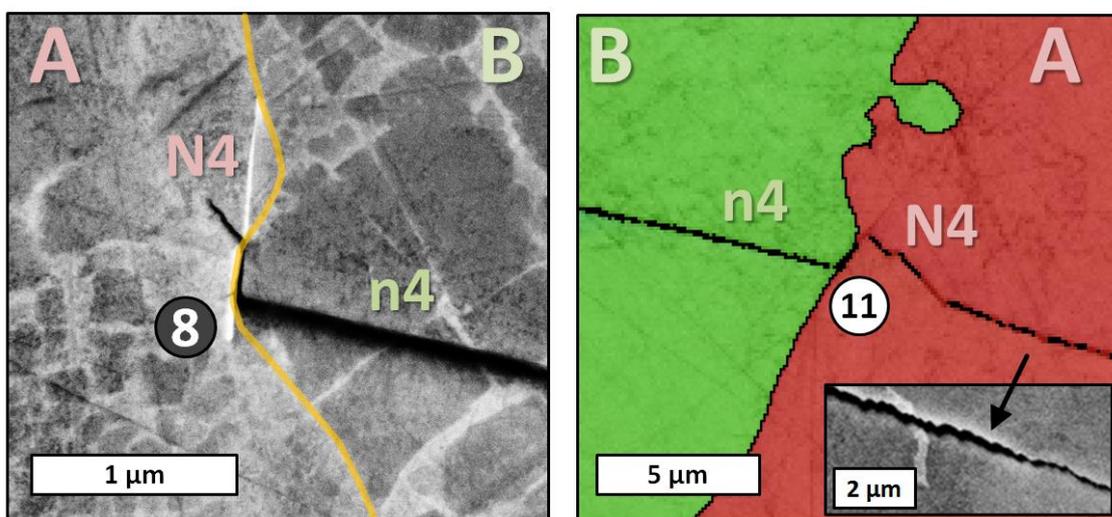


Abb. 5-37: (links, Stelle 8) minimaler Rissübertritt von B nach A, (rechts) deutlicher Risstransfer von Korn B nach Korn A. In beiden Fällen kommt die geometrisch am besten passendste Kopplung zum Tragen (n4 mit N4)

Bei der Konfiguration 11 auf der rechten Seite hingegen ist der Risstransfer unter Beteiligung der Gleitebenenkopplung n-N deutlich zu erkennen. Jedoch etwa 3 µm hinter der Korngrenze beendet der Riss sein Wachstum auf der für den vorangegangenen Übertrittsprozess günstigsten Ebene N, um sich dann unter alternierender Benutzung der zwei Gleitebenen N und L schließlich für ein klassisches Stage I Mikrorisswachstum alleinig auf dem Gleitsystem L4 zu entscheiden. Die folgende Darstellung soll diesen aus mehreren Einzelstapen bestehende Gesamtprozess, ganzheitlich abbilden.

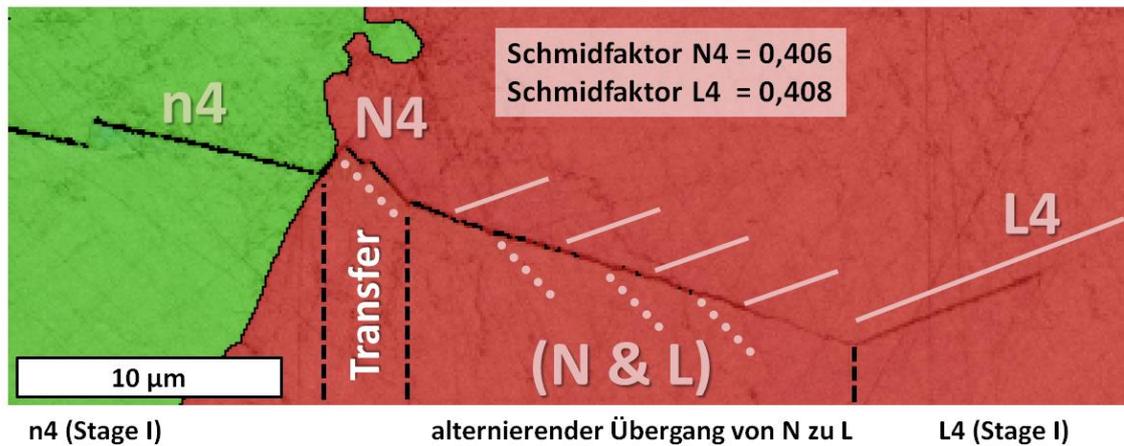


Abb. 5-38: Übersicht des gesamten Riss-Transfer-Prozesses von Korn B nach Korn A in der folgenden Abfolge: n4 Stage I Mikrorisswachstum, Passieren der Korngrenze unter Benutzung der günstigsten Kopplung n4N4, danach alternierende Ausbreitungen auf den Ebenen N und L, um schließlich wieder zu kristallographischem Wachstum (Stage I) auf der für Korn A optimalen Gleitebene L zu wechseln.

Die Frage, ob und in wie weit nun die lokale geometrische Konfiguration der Korngrenze und damit einhergehend, die Passung der bei dem eigentlichen Übertrittsprozess beteiligten Gleitsysteme (n4-N4) ausschlaggebend für den gesamten Rissübertrittsprozess sind, eröffnet vielseitige Ansatzpunkte für weiterführende und tiefergehende Diskussionen. Um an dieser Stelle nur einen Punkt zu erwähnen, sei das Argument aufgeführt, dass davon auszugehen ist, dass der Korngrenzenabschnitt, der zuallererst von der Risspitze erreicht wird, im Falle einer potentiellen Transmission, entscheidenden Einfluss darauf hat, wie der Übertritt zunächst an explizit dieser ersten Stelle vonstatten geht. Die dortige (lokale) Auswahl der Gleitsysteme beeinflusst unweigerlich auch die nachfolgend an anderen Korngrenzenabschnitten ablaufenden Transferprozesse.

Die sich hieraus für das gezeigte Beispiel ergebende Konsequenz ist, dass zwar vor allem die rechtsseitig auftretenden Übertrittsprozesse (Wechselwirkungsstellen 11 bis 14) mit dem Konzept der geometrischen Passung, sowie den mittels der *STRONG*-Methode berechneten Werte in gutem Einklang stehen, letztlich aber nicht zweifelsfrei die Aussage getroffen werden kann, ob nicht eventuell ein Transferprozess zwischen der vierten und fünften Schleifstufe bereits vordefiniert hat, welche Gleitsysteme an dem weiteren in die Tiefe gehenden Rissübertritt beteiligt sind.

Gleichwohl sprechen die Vorgänge auf der linken Seite (Stellen 1 bis 10) für die Aussagekraft des *STRONG*-Modells. Alle Korngrenzenabschnitte, vor denen das Risswachstum bereits in einigen 10 µm Abstand stoppte, weisen hohe Korngrenzenwiderstände auf. Lediglich die Korngrenze mit dem niedrigsten Widerstandswert, Stelle 8 mit  $\omega = 0,035$ , erlaubte die Annäherung des Risses bis unmittelbar an die Korngrenze und überdies sogar den Ansatz einer Transmission. Der Umstand, dass der in Abb. 5-37

(links) gezeigte Rissübertrittsprozess, bestehend aus dem von Korn B ankommenden Risspfad, sowie dem minimalen „Zipfel“ in Korn A, nahezu nahtlos über die Korngrenze erfolgt, spricht dafür, dass der sich hier abzeichnende Transferprozess in unmittelbarer Nähe dieses Schliffs abgespielt haben muss, was wiederum die Eigenschaft der geometrischen Kompatibilität als entscheidenden Faktor in den Vordergrund rücken lässt.

Den Ergebnisteil zusammenfassend und gleichzeitig die Diskussion einleitend, lassen sich die in diesem Kapitel präsentierten Resultate, wie folgt zusammentragen:

- Der reine Begriff der Fehlorientierung zwischen zwei benachbarten Körnern greift für eine vollständige Beschreibung der geometrischen Gegebenheiten zu kurz, da er der räumlichen Orientierung der Korngrenze keinerlei Rechnung trägt.
- Die Lage der Korngrenze hat jedoch maßgeblichen Einfluss auf die Kompatibilität der benachbarten Gleitsysteme. Deren jeweilige Passung auf bzw. in der Korngrenzenebene kann quantifiziert werden, indem man die Winkel, sowohl zwischen den Gleitebenenschnitten mit der Korngrenze, als auch zwischen den Gleitrichtungen erfasst (LRB-Modell verbunden mit Clarks Transmissionsfaktor).
- Während die Winkel  $\beta$  zwischen den möglichen Gleitrichtungskopplungen bereits alleine durch die Lage der benachbarten Kristallorientierungen bestimmt sind, gestaltet sich die Bestimmung der kongrenzenabhängigen  $\alpha$ -Winkel in zweifacher Hinsicht schwierig. Zum einen ist der Korngrenzenverlauf unterhalb der Probenoberfläche im Allgemeinen nicht zugänglich und nur unter gewissen Voraussetzungen teilweise abschätzbar. Zum anderen ist die Korngrenze im Regelfall eine gekrümmte Fläche, die jeweils nur lokal durch eine Tangentialebene angenähert werden kann.
- Eine Ausnahme bildet der Fall der kohärenten Zwillingskorngrenze, deren Korngrenzenebene der Zwillingssebene entspricht und damit deren räumliche Lage alleine durch die Orientierung der Zwillingsbeziehung vollständig bekannt ist.
- Die trotz identischer Gesamtgeometrie unterschiedlichen Ausprägungen von möglichen Gleitsystemkopplungen und damit verbundenen Schädigungsmechanismen lassen sich mit der jeweils unterschiedlichen Verteilung der Gleitsystemaktivität in Verbindung bringen.
- Das lokale Ausbreitungsverhalten (Riss-Stop und Riss-Transfer) eines mittels Tomographie untersuchten dreidimensionalen Ermüdungsrisses konnte mit dem in dieser Arbeit entwickelten Konzept des geometrischen Korngrenzenwiderstandes (berechnet mittels der *STRONG*-Methode) in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben werden.

Um das *STRONG*-Konzept hinsichtlich seines quantitativen Charakters zu verbessern, besteht im nächsten Schritt zum einen die Notwendigkeit die innerhalb des Modells auftretenden Schwierigkeiten zu diskutieren, wie sie bspw. die Erfassung bzw. Näherungen der Korngrenzenlage mit sich bringen und zum anderen natürlich auch, wie sich denkbare Einflüsse außerhalb des Modells auf die Gesamtproblematik auswirken, wie z.B. lokale Spannungsinhomogenitäten, welche möglicherweise die Verteilung der relevanten Gleitsystemaktivität maßgeblich beeinflussen. Diese und weitere Aspekte sollen Gegenstand des folgenden Diskussionsteils sein.

## 6 Diskussion

Im Zentrum des *STRONG*-Modells und den darauf basierenden Berechnungen stehen die Kenntnis der räumlichen Lage der Korngrenze, sowie deren Interpretation als Ebene. Während im Spezialfall der Zwillingskorngrenze beide Kriterien bestmöglich erfüllt sind, kommen alle anderen Fälle nicht ohne Näherungsannahmen aus. Die erste im Ergebnisteil vorgestellte Näherung war die Annahme von senkrecht in die Tiefe verlaufenden Korngrenzen, was im Falle der entsprechenden Flachzugproben, aufgrund des Verhältnisses zwischen Korngröße und Probendicke, näherungsweise gerechtfertigt war. Da diese Bedingung in vielen anwendungsrelevanten Fällen in dieser Form nicht vorliegt, der Tiefenverlauf der Korngrenze also weithin unbekannt ist, scheidet eine solche Abschätzung für den Tiefenwinkel  $\varepsilon$  aus. Wie sich trotz dieser Unkenntnis, eine sinnvolle Einschätzung des Passungscharakters der beteiligten Nachbarkörner bewerkstelligen lässt, soll in dem folgenden Abschnitt dargestellt werden.

### 6.1 Fehlpassung bei teilweiser oder vollständiger Unkenntnis der Korngrenzenorientierung

#### 6.1.1 Unkenntnis des Tiefenverlaufs der Korngrenze

Ist der Parameter  $\varepsilon$  unbekannt, bleibt die Lage der Korngrenzebene unbestimmt und somit auch das Ausmaß möglicher Gleitsystempassungen auf eben dieser. Der geometrische Korngrenzenwiderstand bleibt dann für jede einzelne der 144 möglichen Gleitsystemkopplung, ausgedrückt durch  $\omega_{i,j}(\varepsilon)$ , also explizit für jede einzelne Kopplung eine Funktion von  $\varepsilon$  (vergleiche hierzu Kapitel 4.5). Der Unkenntnis dieses entscheidenden Parameters kann nun wie folgt Rechnung getragen werden, indem in einem Zwischenschritt gedanklich einfach alle möglichen Werte für  $\varepsilon$  angenommen werden und die damit einhergehenden konkreten Funktionswerte in ihrer Gesamtheit interpretiert werden. Die Durchführung dieses Ansatzes anhand mehrerer Beispiele zeigt erwartungsgemäß, dass die Variation von  $\varepsilon$  nicht mit einem regellosen Verlauf der Funktionswerte  $\omega_{i,j}(\varepsilon)$  einhergeht, sondern sich im Regelfall ein kontinuierlicher Funktionsverlauf ergibt, wie die in der folgenden Abbildung dargestellten Fälle konkreter Gleitsystemkopplungen verschiedener ausgewählter Nachbarschaftsverhältnisse demonstrieren. Es ist hierbei zu beachten, dass für jeden Betrachtungsfall exemplarisch nur eine repräsentative der je 144 Kopplungen aufgeführt ist.

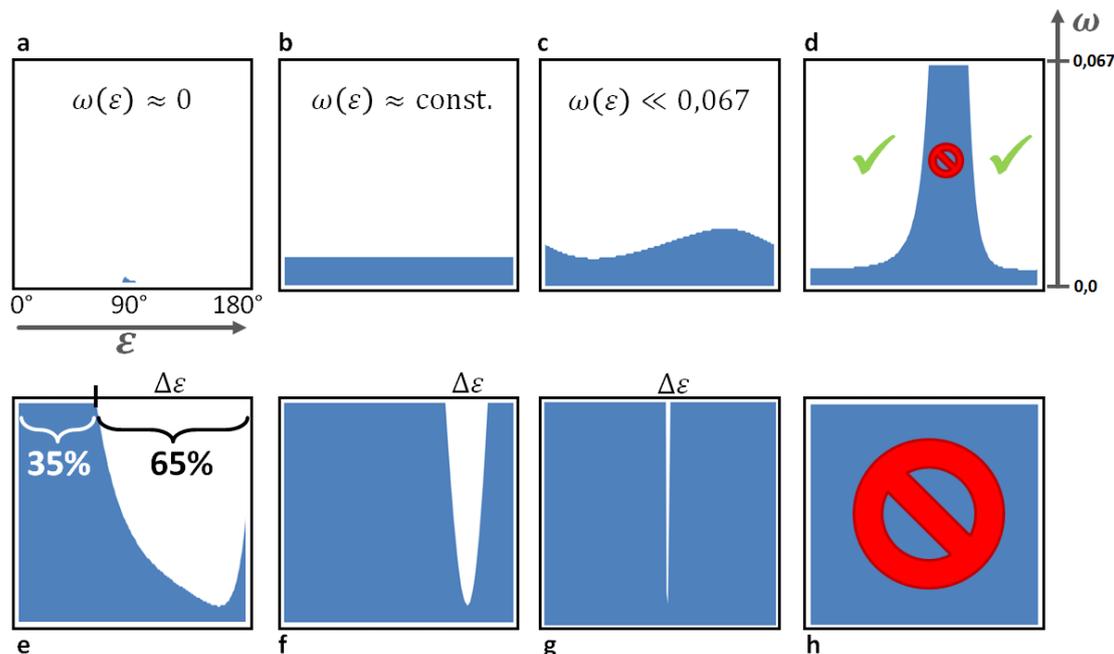


Abb. 6-1: Interpretation verschiedener charakteristischer Funktionsverläufe für  $\omega(\varepsilon)$

Die in Abb. 6-1 gezeigten Fälle a) bis h) sollen im Folgenden kurz einzeln erläutert werden:

- a) Für alle möglichen  $\varepsilon$ -Werte, d.h. alle denkbaren Tiefeneneigungswinkel der Korngrenze ergibt sich eine nahezu optimale Passung mit entsprechenden Widerstandswerten von ungefähr Null. Dieser Spezialfall liegt bei der Kopplung der gemeinsamen Symmetrieebenen im Falle einer Zwillingsbeziehung vor. Da die beiden Kristalliten gemeinsame Ebene per se koinzident liegt, handelt es sich somit um eine uneigentliche Passung, die deshalb für alle denkbaren gedachten Korngrenzebenen erfüllt ist.
- b) Es kann jedoch auch der Fall vorliegen, dass zwei benachbarte Gleitebenen die Korngrenze so schneiden, dass der so eingeschlossene Schnittwinkel trotz Variation der Korngrenzebene nahezu konstant bleibt,
- c) bzw. nur leicht variiert und die Widerstandswerte insgesamt unterhalb des Grenzwertes von 0,067 liegen. D.h. auch in diesen beiden Fällen kann ohne Kenntnis der tatsächlichen Korngrenzenneigung geschlussfolgert werden, dass unbeachtlich eines konkreten  $\varepsilon$ -Wertes in allen Fällen eine günstige Passung vorliegt. Dieses Szenario ist jedoch eher selten.
- d) bis g) stellen die typischen Fälle dar, bei denen gewisse Korngrenzenneigungen zu Passungen führen und andere wiederum nicht. Je breiter die blaue Kurve, desto geringer die Anzahl der möglichen  $\varepsilon$ -Werte, welche eine geometrisch passende Kopplung begünstigen. Um diesen Anteil bezogen auf die insgesamt möglichen

Neigungswinkel zu quantifizieren, lässt sich einfach der Quotient  $\Delta\varepsilon/180^\circ$  bilden, um damit ein Maß für sozusagen die Wahrscheinlichkeit für das Vorliegen einer günstigen Lage zu definieren. Im Fall e) beträgt dieser Quotient bspw. 65%. Für die Fälle f) und g) schrumpft der Bereich  $\Delta\varepsilon$ , entsprechend verringert sich die Wahrscheinlichkeit, dass die Korngrenze zufällig in einer günstigen  $\varepsilon$ -Lage vorliegt.

h) beschreibt den zu a) gegenläufigen Fall, dass egal wie die Korngrenze auch geneigt sein mag, sich keine Möglichkeit für eine geometrisch passende Kopplung ergibt, da alle Widerstandswerte  $\omega(\varepsilon)$  oberhalb des Grenzwertes liegen.

Dieses probabilistische Beurteilungskonzept eröffnet nun die Möglichkeit eine Bewertung des Passungscharakters von Korngrenzen ohne die vollständige Information über deren räumliche Lage, also in diesem Fall des Parameters  $\varepsilon$  zu haben. Angewandt auf das im Ergebnisteil gezeigte Beispiel der Korngrenzen GB16 und GB15 von Probe P1 führt dieses Konzept zu dem Ergebnis, dass man (zumindest in diesen beiden Fällen) auch ohne die Kenntnis von  $\varepsilon$  im Endeffekt zu der gleichen Beurteilung gelangt, wie vorher auf der Grundlage vollständiger Informationen. Dies soll die folgende Darstellung veranschaulichen.

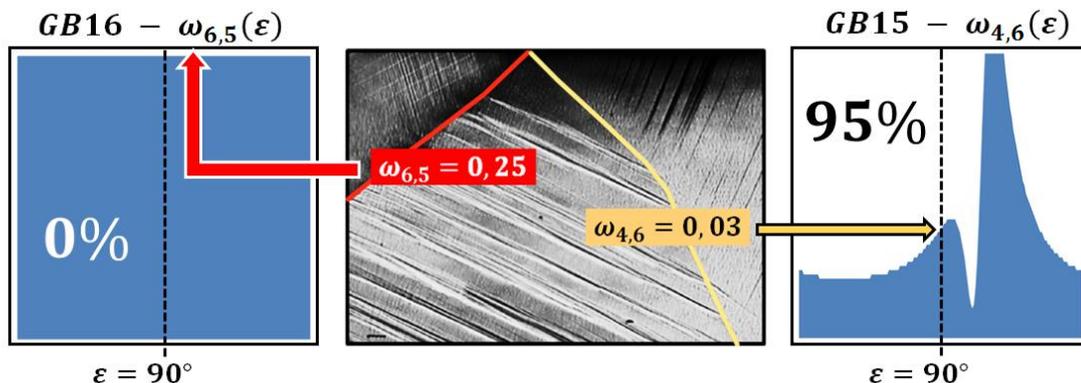


Abb. 6-2: (links) alle Werte  $\varepsilon$  führen zu hohen Widerstandswerten, (rechts) in 95% der Fällen liegen die Widerstandswerte unterhalb des Grenzwerts, entsprechend hoch die Wahrscheinlichkeit, dass eine willkürliche Tiefenneigung tatsächlich in einer solchen Lage vorzufinden ist.

Die Blockierungswirkung der linken Korngrenze (GB16) ist nicht nur im wörtlichen Sinne wahrscheinlich, sondern rein rechnerisch für alle in Frage kommenden Korngrenzenneigungen de facto gegeben. Im rechten Fall, der Korngrenze (GB15) sind theoretisch beide Effekte möglich, Blockade und Transmission, wobei die Tendenz zur Transmission mit einer relativen Häufigkeit von 95% der denkbaren Neigungswinkel deutlich höher ausfällt als der gegenteilige Fall. Da die reale im Experiment vorliegende Korngrenze mit einem senkrechten Tiefenverlauf angenähert wurde und dieser  $\varepsilon$ -Wert

von  $90^\circ$  innerhalb des 95%-Bereichs liegt, führen beide Berechnungen, die konkrete ( $\delta$  und  $\varepsilon$  bekannt), sowie die probabilistische (nur  $\delta$  bekannt), zu dem gleichen Ergebnis. Läge die tatsächliche Korngrenzenneigung in dem komplementären 5% Bereich, so würde das Konzept in diesem Falle versagen. Deshalb darf der Wahrscheinlichkeitscharakter der im Folgenden gemachten Bewertungen zu keinem Zeitpunkt außer Acht gelassen werden.

Dieser Aspekt ist jedoch der Preis dafür, dass die *STRONG*-Methode eine Bewertung eines gesamten Gefüges erlauben soll, die in Ermangelung der Kenntnis der individuellen Tiefenverläufe der einzelnen Korngrenzen auszukommen hat. Eine solche Gesamtbeurteilung, bestehend aus der Quantifizierung aller im Gefüge befindlicher Korngrenzenwiderstände, alleine auf der Grundlage eines einzigen EBSD-Scans stellt eines der wesentlichen Hauptergebnisse dieser Arbeit dar. Um die Aussagekraft der Methode zu untermauern soll die bereits im Ergebnisteil präsentierte Fehlpassungs-Map (mit bekanntem  $\delta$  sowie der Annahme  $\varepsilon = 90^\circ$ ) reproduziert werden, indem nun auf die  $\varepsilon$ -Information bewusst verzichtet wird. D.h.  $\varepsilon$  bleibt unbekannt, im Sinne von variabel. Analog zur ursprünglichen Map erfolgt deshalb die Prüfung, welche der aktiven ( $SFK > 0,09$ ) Gleitsystemkopplungen trotz variablem  $\varepsilon$  für mindestens die Hälfte aller denkbaren  $\omega(\varepsilon)$ -Widerstandswerte unterhalb des Grenzwertes 0,067 liegen (vgl. Abb. 6-1e).

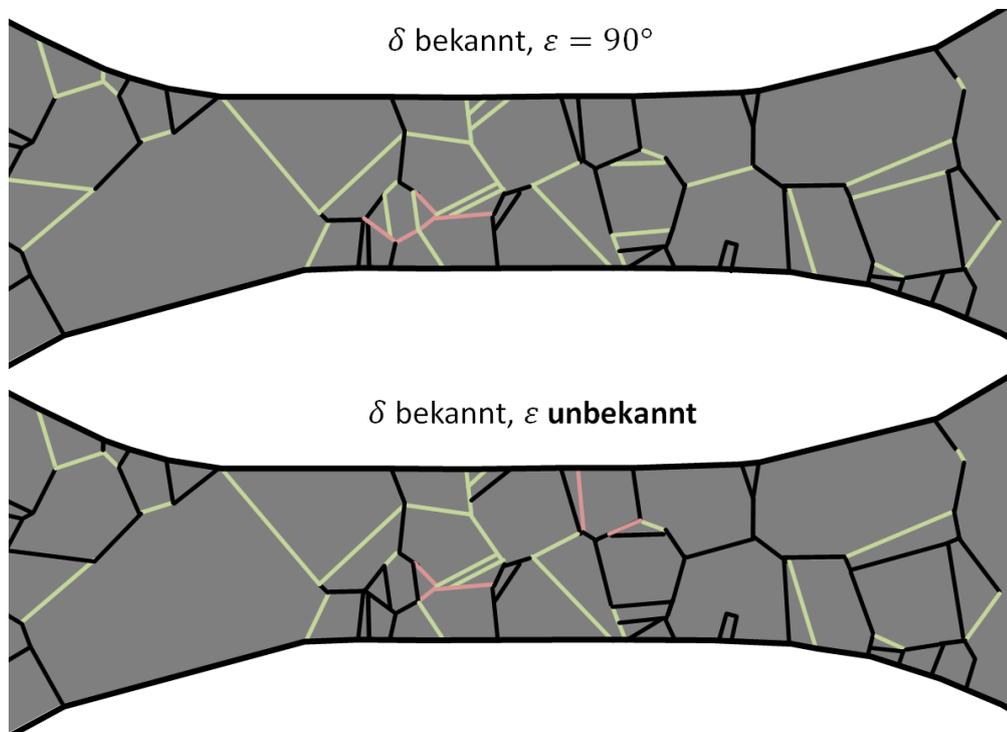


Abb. 6-3: Vergleich der Fehlpassungs-Maps mit und ohne Kenntnis von  $\varepsilon$ .

Farbcode der Korngrenzen: (schwarz) Barrierecharakter, (hellgrün) Transmission in Theorie und Experiment, (hellrot) nur theoretisch vorliegende Transmissionstendenz, da keine Gleitlinientransferprozesse feststellbar

Diese Bedingung wird immer noch von 41 Korngrenzen erfüllt. Von den zuvor – also bei bekanntem  $\varepsilon$  – 44 lokalisierten transmissionsaffinen Korngrenzen von denen 38 tatsächlich Gleittransferprozesse zeigten (hellgrüne Linien) werden auch bei dieser zweiten Berechnung, die wohlgemerkt wegen Unkenntnis von  $\varepsilon$  auf einer ungenaueren Basis ruht, immerhin noch 37 potentiell passende (teilweise auch andere) Korngrenzen vorhergesagt. Von den somit sieben Korngrenzen, die nicht mehr identifiziert wurden, waren zwei Korngrenzen dabei, die ohnehin keine feststellbare Gleittransmission zeigten (hellrote Linien), jedoch auch vier andere, für die also die Vorhersage zum falschen Ergebnis geführt hat. Trotzdem lässt sich festhalten das die große Mehrheit der tatsächlich auftretenden Gleittransferprozesse auch in der zweiten Berechnung (mit dem  $\varepsilon$ ) knorrekkt vorhergesagt werden konnte, was sich auch durch einen visuellen Vergleich der beiden Maps in Abb. 6-3 qualitativ bestätigen lässt. Eine anschauliche Darstellung der guten Übereinstimmung, der soeben beschriebenen zahlenmäßigen Gegenüberstellung soll die folgende Abbildung ermöglichen.

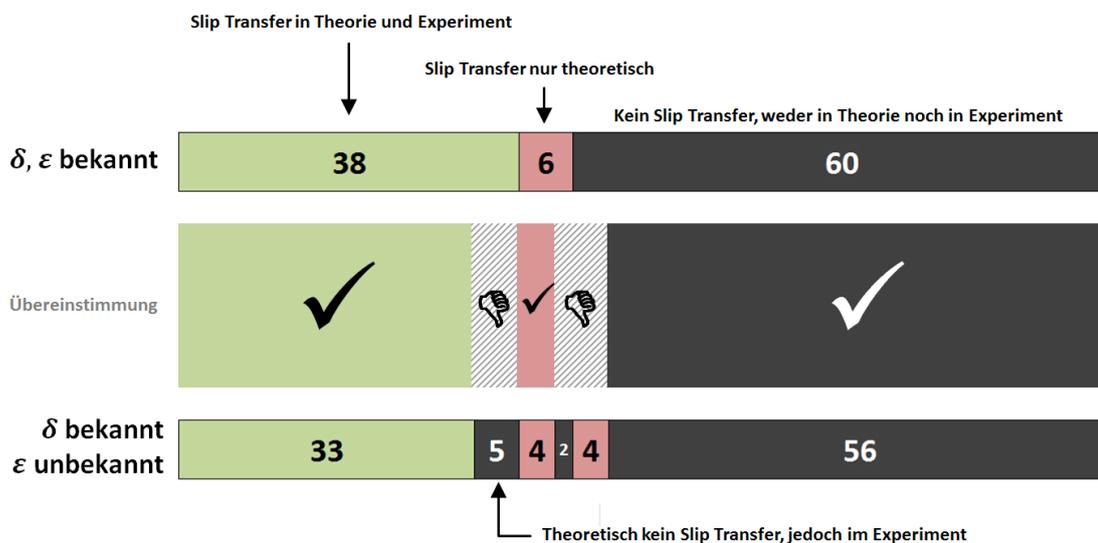


Abb. 6-4: Veranschaulichung der Übereinstimmung der jeweiligen Vorhersagen bezüglich der Tendenz zur Gleittransmission und dessen tatsächliches Auftreten für beide Szenarien bzgl. der Kenntnis des Parametes  $\varepsilon$  (vgl. Abb. 6-3). Für 93 der insgesamt 104 Korngrenzen sind die mittels *STRONG* kalkulierten Vorhersagen identisch (vgl. Balken in der Mitte).

Um nun insbesondere die Abweichungen zwischen berechneter Transmissionsaffinität und tatsächlich ausbleibender Transmission zu untersuchen, wäre eine genaue Erfassung der realen Korngrenzenneigung im Probeninneren notwendig. Eine andere Alternative um den Einfluss der Korngrenzenorientierung zu studieren bietet die Untersuchung von solchen Korngrenzen, deren Verlauf an der Oberfläche eine sichtliche Krümmung aufweisen, wie das folgende Beispiel in Abb. 6-5 zeigen soll.

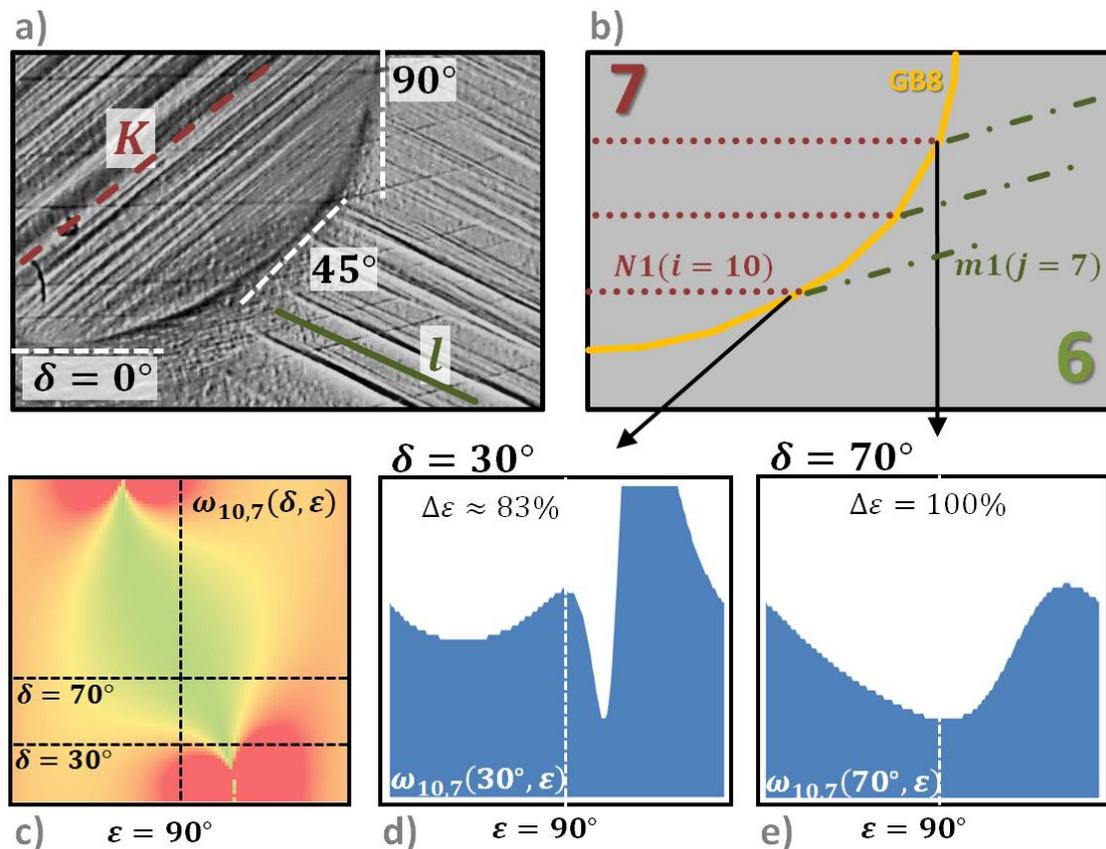


Abb. 6-5: Variation von  $\delta$  mittels gekrümmten Korngrenzenverlaufs: a) Hauptaktive und nebenaktive Gleitlinien, b) Kopplung der nebenaktiven Gleitsysteme N1-m1, c) Farbkachel für diese Kopplung, d) und e)  $\epsilon$ -Abhängigkeit für  $\delta$  gleich  $30^\circ$  bzw.  $70^\circ$

Das Nachbarschaftsverhältnis der Körner 7 und 6 (Probe 1) wird an der Oberfläche durch eine Korngrenzenlinie begrenzt, die nahezu einen Viertelkreis, also im Sinne der Erfassung mittels des Twistwinkels  $\delta$ , alle Werte zwischen  $0^\circ$  und  $90^\circ$  durchläuft (vgl. Abb. 6-5a). Neben den jeweils hauptaktiven Gleitsystemen (K in 7 und l in 6), die ihrerseits nicht miteinander koppeln, ist zu erkennen, dass die etwas zarteren Gleitlinien, zu N (Korn 7) bzw. m (Korn 6) gehörend, einen Gleittransferprozess tragen und dies wohl-gemerkt entlang eines verhältnismäßig großen Abschnitts der Korngrenzenlinie (vgl. Abb. 6-5b). D.h. also, dass trotz der starken Variation von  $\delta$ , also der Krümmung in der Oberfläche, die geometrischen Bedingungen für die Transmission scheinbar gleichbleibend erfüllt sind. Tatsächlich ist es so, dass bspw. für ein Wert  $\delta = 70^\circ$  der Korngrenzenwiderstand  $\omega_{10,7}(70^\circ, \epsilon)$  für alle denkbaren  $\epsilon$ -Werte unterhalb des kritischen Wertes von 0,067 liegen, wie der Kurvenverlauf in Abb. 6-5e zeigt. Unabhängig von der Kenntnis der konkreten Tiefenneigung der Korngrenze bedeutet dies also, dass egal wie die Neigung im Probeninneren auch sein mag, letztlich durch alle denkbar möglichen Neigungen ( $\Delta\epsilon = 100\%$ ) die Transmissionsbedingungen erfüllt werden. Eine oberflächliche Krümmung von  $\delta = 30^\circ$  führt hingegen nicht zu dem gleichen Resultat. In

dieser Konstellation kommen einige  $\varepsilon$ -Werte in Betracht, welche dazu führen, dass der 0,067-Grenzwert übertroffen wird, also im geometrischen Sinne keine Transmission mehr erwartet wird. Dennoch zeigen auch in diesem Fall etwa 83 % der denkbaren  $\varepsilon$ -Konfigurationen eine Tendenz zur Transmission (vgl. Abb. 6-5d).

Es drängt sich also der Eindruck auf, dass die geometrische Passung für die in jenem Beispiel gezeigte Gleitsystemkopplung ( $i = 10, j = 7$ ) offenbar nur unwesentlich von der tatsächlichen Lage der Korngrenze abhängt. In der Tat zeigt, die in Abb. 6-5c gezeigte Farbkachelmatrix einen weitläufigen grün-gelb-Verlauf, der gerade jene Bereiche günstiger Korngrenzenorientierungen ( $\delta, \varepsilon$ ) ausweist. Ersetzt man diese kontinuierliche Farbcodierung durch einen binären Farbcode, wie z.B. einheitlich grün für geometrische Korngrenzenwiderstände  $\omega$  kleiner als 0,067 und einheitlich rot entsprechend für Werte oberhalb des Grenzwertes gelangt man zur folgenden Darstellung:

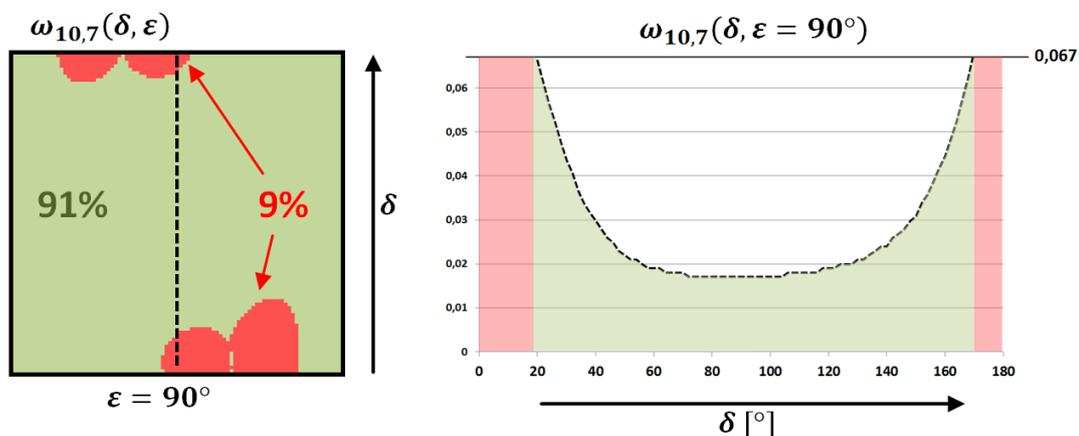


Abb. 6-6: (links) Binäre Reduktion der Farb(verlaufs)kachel aus Abb. 6-5 in „passend“ und „nicht passend“ für alle denkbar möglichen Korngrenzenkonfigurationen.  
(rechts)  $\delta$ -Abhängigkeit vom Korngrenzenwiderstand für konstant angenommenes  $\varepsilon = 90^\circ$

Bezogen auf alle erlaubten Korngrenzenkonfigurationen ohne jedwede Einschränkungen bezüglich  $\delta$  und/oder  $\varepsilon$  fällt in der linken Darstellung sofort auf, dass die große Mehrheit (91%) aller Korngrenzenorientierungen (für diese eine Gleitsystemkopplung (10-7)) mit geometrisch günstigen Passungen einhergehen. Betrachten wir den im Beispiel vorliegenden Fall – mit der Annahme, dass die Korngrenze senkrecht durch die Probendicke verläuft, also  $\varepsilon = 90^\circ$  (vgl. Abb. 6-6 links), so erkennt man, dass zwar im Anfangsbereich  $\delta = 0^\circ$  bis etwa  $20^\circ$  potentielle Transmission blockiert ist, für den sich daran anschließenden Bereich hingegen nicht. Dieses Ergebnis stimmt mit dem experimentell erfassten Gleitlinien(transfers)verlauf sehr gut überein, wenngleich die Werte kleiner als  $\delta = 20^\circ$  kritisch zu betrachten sind, da sich die Korngrenzenlinie in dieser Zone sehr nahe am Tripelpunkt befindet, weshalb hier mit zusätzlichen Rahmenbedingungen zu rechnen ist, welche die lokale Gleitsystemaktivität beeinflussen.

Um nun ein Nachbarschaftsverhältnis, für das aufgrund der starken Korngrenzenkrümmung, sowohl in der Oberfläche, als auch anzunehmenderweise im Probeninneren, eine seriöse Abschätzung der Korngrenzenorientierung somit nur schwerlich möglich ist, in Gänze zu beurteilen, muss im Sinne der *STRONG*-Berechnungsmethode de facto von einer vollkommenen Unkenntnis beider Korngrenzenparameter  $\delta$  und  $\varepsilon$  ausgegangen werden. Wie sich dennoch auf dieser Grundlage eine Bewertung ableiten lässt, soll im folgenden Abschnitt behandelt werden

### 6.1.2 Unkenntnis beider Parameter

Die folgende Abbildung bezieht sich auf das zuvor gezeigte Beispiel der Nachbarschaft aus Korn 6 und Korn 7 (Korngrenze GB8 in Probe 1). Die Gesamtgleitsystemkopplungsmatrix wird also repräsentiert durch die Farbkachelmatrix, die ihrerseits analog zu der bereits eingeführten Grenzwertbetrachtung wiederum massiv reduziert werden kann, indem jede Farbkachel (und die darin 180x180 enthaltenen Korngrenzenkonfigurationen) durch einen Quotienten ersetzt wird, der den Anteil geometrisch passender Konfigurationen zur Anzahl aller denkbaren Konfigurationen bemisst. Einfacher ausgedrückt, soll jede Farbkachel analog zur Vorgehensweise aus Abb. 6-6 auf eine Zahl reduziert werden, die wiederum den prozentualen Anteil des nicht(!) roten Bereichs erfasst, also die Widerstandswerte kleiner als 0,067. Diese – aufgrund der Reduktion – nun wiederum aus 144 Einträgen bestehende Matrix wird als Passungsmatrix  $\Pi_{ij}$  bezeichnet und beinhaltet somit für jede einzelne Kopplung ein wiederum statistisches Maß für die Wahrscheinlichkeit, dass mit einer geometrisch günstigen Korngrenzenlage zu rechnen ist. Mit diesem Schritt wird gleichsam ein Logikwechsel vollzogen, da sozusagen nun wieder das Maß der Passung im Vordergrund steht und entsprechend komplementär ein Größe für den Widerstand.

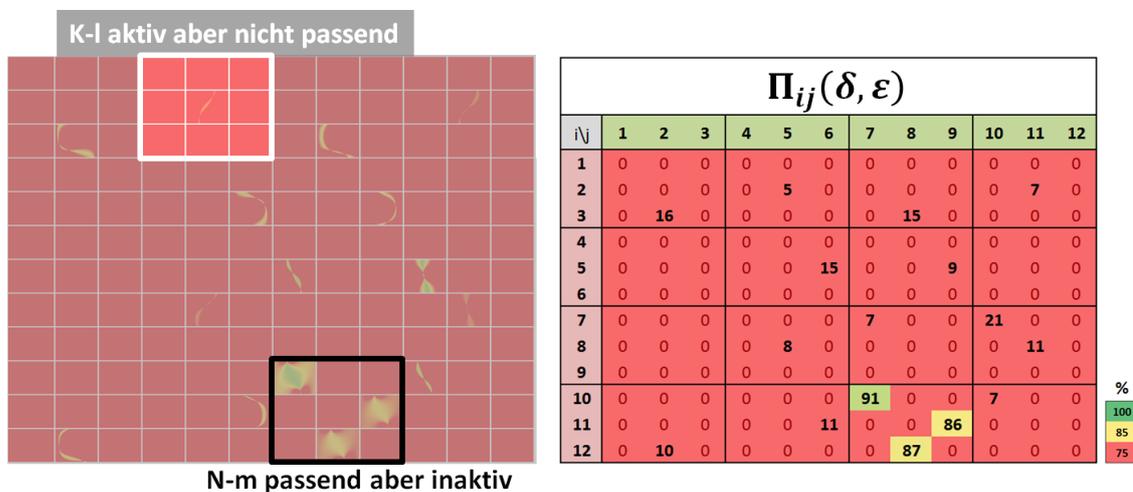


Abb. 6-7: (links) Farbkachelmatrix  $\omega_{ij}(\delta, \varepsilon)$  und deren Reduktion zu  $\Pi_{ij}(\delta, \varepsilon)$

Interpretiert man nun das Ergebnis dieser Darstellung eingedenk der Verteilung der Gleitsystemaktivität, so lässt sich die Aussage ableiten, dass der grau umrandete Kopplungsbereich trotz (scheinbar) mangelnder Aktivität, alleine wegen der drei geometrisch günstigen Kopplungen mit den Werten 91 %, 87 % und 86 % schließlich doch zu dem, wenn auch nur schwach ausgeprägten, Auftreten von Gleittransmission führt, wie in Abb. 6-5 gezeigt. Da jedoch die beiden benachbarten hauptaktiven Gleitungen nahezu komplett inkompatibel sind (denn von grundsätzlich möglichen neun Kopplungen [weiß umrandet] kommt nur eine in Frage und diese auch nur mit 5%), kann der Korngrenze dieses Nachbarschaftsverhältnisses in Summe ein Barrierecharakter attestiert werden.

Ausschlaggebend für diese schlussendliche Beurteilung bleibt jedoch die Verknüpfung von Passung und Aktivität. Während die Passung mehr oder minder, d.h. je nach Betrachtungsfall konkret oder auch statistisch, letztlich im Rahmen der *STRONG*-Methode berechenbar bleibt, so steht die Annahme eines als homogen angenommenen globalen Spannungsfeldes ohne jedwede Berücksichtigung etwaiger Spannungsinhomogenitäten auf einer stets unsicheren Basis. Um das Konzept des geometrischen Korngrenzenwiderstandes von diesen Unwägbarkeiten zu entkoppeln, stellt sich die Frage, ob und wie sich eine finale Reduktion der bereits reduzierten Passungsmatrix  $\Pi_{ij}$  bewerkstelligen lässt.

## 6.2 Definition der fundamentalen Passung

Betrachtet man alle Einzelnen der 144  $\Pi_{ij}$  Passungen als gleichberechtigt aktiv bzw. inaktiv, ergibt sich die Möglichkeit einer Art Mittelwertbildung gemäß der folgenden Gleichung,

$$\Pi = \frac{1}{C} \sum_{ij} \Pi_{ij} \quad (55)$$

$C$  ist hierbei eine Konstante, welche die fundamentale (skalare) Passung  $\Pi$  auf 1, also 100 % normiert. Ihr numerischer Wert ist 1396.

die gleichsam im Ergebnis die sogenannte fundamentale geometrische Passung  $\Pi$  als skalare Größe definiert. Die folgende Abbildung soll diesen Schritt anhand eines Beispiels verdeutlichen.

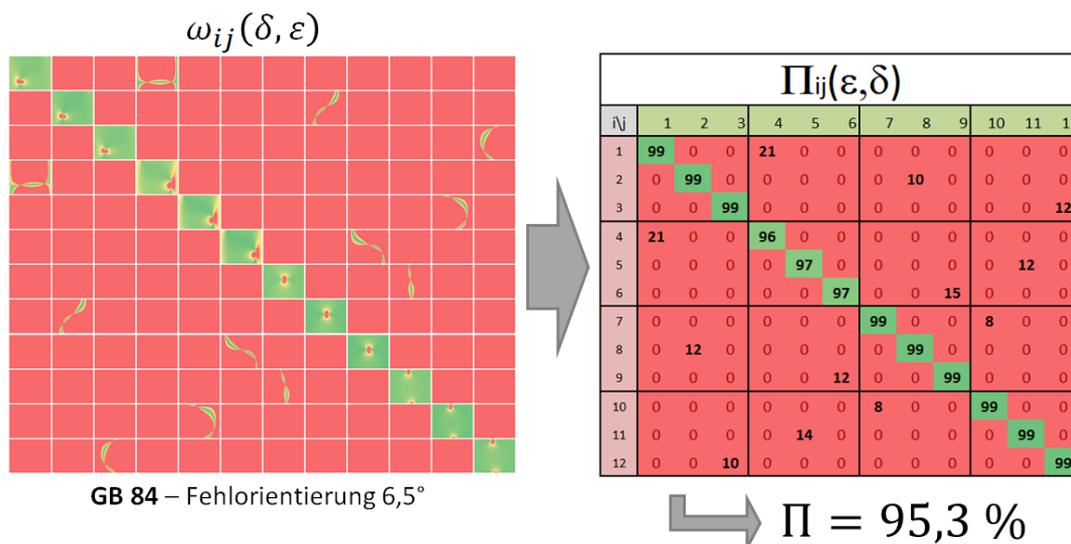


Abb. 6-8: Reduktion der Widerstandsmatrix zur Passungsmatrix und schließlich zur fundamentalen Passung  $\Pi$

Die gezeigte schrittweise Reduktion der Widerstandsmatrix  $\omega_{ij}$  zur Passungsmatrix  $\Pi_{ij}$  und daran anschließend zu der fundamentalen Passung  $\Pi$  ergibt für dieses Beispiel einen Wert von 95,3 %. Dieser hohe Wert steht in Einklang mit Tatsache, dass sich das Nachbarschaftsverhältnis der Korngrenze 84 lediglich durch eine Fehlorientierung von 6,5° auszeichnet, es sich folglich um eine Kleinwinkelkorngrenze handelt, die per se mit einer guten geometrischen Kompatibilität einhergeht. Würde man ein Nachbarschaftsverhältnis mit der Missorientierung von 0° betrachten, was de facto dem Pseudofall zweier identischer Nachbarkristallite entspricht, so erhielte man eine Passung von exakt 100 %. Dieser rein theoretische Fall definiert die Normkonstante  $C$  in der Definitionsgleichung für  $\Pi$ , Gleichung (55). Der numerische Wert dieser Konstanten ist 1396. Dieser Wert ergibt sich zum einen aus den 12 Einträgen der Hauptdiagonalen à 100 %, also 1200, sowie der Summe der Einzelpassungen weiterer 12 Nebendiagonalelementen, die im Falle der gewählten 0,067-Grenzwertkonvention einen zusätzlichen Betrag von 196 ergeben. Ein Vergleich mit Abb. 6-8 zeigt die insgesamt 24 (aufgrund der kubischen Symmetrie) von Null verschiedenen Kacheln, welche schließlich den Betrag der fundamentalen Gesamtpassung ausmachen.

Es stellt sich nun die Frage, wie sich dieser Begriff bzw. konkret der Wert dieser Gesamtpassung interpretieren lässt. Hierzu kann in einem weiteren Schritt allen 104 in der Probe 1 betrachteten Korngrenzen ihr entsprechender Wert  $\Pi$  zugeordnet werden. Wie bereits mehrfach praktiziert bietet sich für eine gemeinsame Auftragung die Sortierung nach der Missorientierung der einzelnen Nachbarschaftsverhältnisse an.

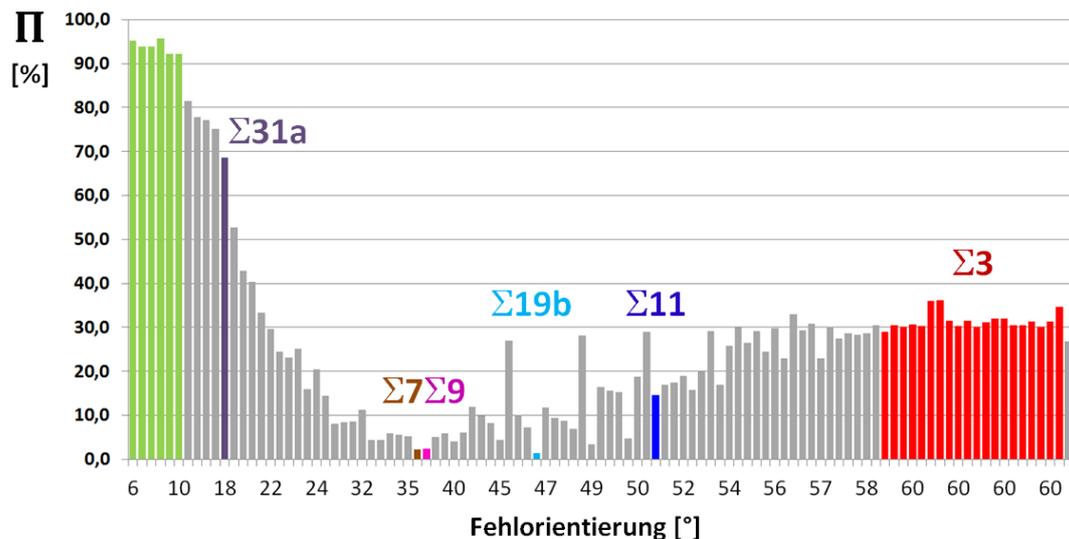


Abb. 6-9: Auftragung der fundamentalen Gesamtpassung der 104 Korngrenzen, sortiert nach deren Fehlorientierung

An der in Abb. 6-9 gezeigten Darstellung lässt sich ein erster Eindruck einer Korrelation zwischen Passung und Fehlorientierung gewinnen. Die Kleinwinkelkorngrenzen (grün) zeigten eine erwartungsgemäß gute Passung mit Werten oberhalb von 90 %. Mit steigender Fehlorientierung sinkt die Passung rapide, sodass ab etwa 20° Fehlorientierung sämtliche Passungen unterhalb von 50 % liegen. Die kleinsten Werte werden erreicht für die CSL- $\Sigma$ -Korngrenzen 7, 9 und 19b. Weiterhin fällt ins Auge, dass in dem Fehlorientierungsbereich zwischen 20° bis etwa 55° die Passungswerte insgesamt sehr niedrig ausfallen, jedoch ab 55° wieder ansteigen und in dem Bereich um 60°, welcher die Zwillingskorngrenzen beinhaltet, auf einem mit etwa 30 % konstanten Niveau liegen. Die Zwei Korngrenzen mit maximaler Fehlorientierung, also am Ende des Fehlorientierungsspektrums zwischen 60° und 62,8°, zeigen wiederum eine leicht geringere Passung. Dieses Verhalten zeichnete sich bereits bei der Fehlorientierungs-Map der Probe 1 ab, die in dem genannten Spektrum (20° bis 55°) so gut wie keine transmissionsaffinen Korngrenzen auswies (vgl. Abb. 5-11). Diese Interpretationsweise steht somit teilweise im Gegensatz zu der konventionellen Annahme, dass die Fehlorientierung eines Nachbarschaftsverhältnisses direkt mit dessen Güte der Gleitsystemkompatibilität korreliert.

Bei einer weiteren Analyse des in Abb. 6-9 gezeigten Verlaufs der einzelnen Passungen stellt sich die Frage, ob der teilweise fluktuierende Verlauf der Passungen, auf die aus statistischer Sicht lediglich nur 104 betrachteten Korngrenzen zurückzuführen ist, oder ob es analog zu den drei signifikanten Minima der genannten  $\Sigma$ -Korngrenzen (7, 9 und 19b) weitere besondere Fehlorientierungsbeziehungen gibt, die – umgekehrt – zu lokalen Maxima führen. Um dies zu untersuchen, wohlgermerkt auf einer statistisch soliden Basis, wurden in einem weiteren Schritt 10.000 Nachbarschaftsverhältnisse simuliert.

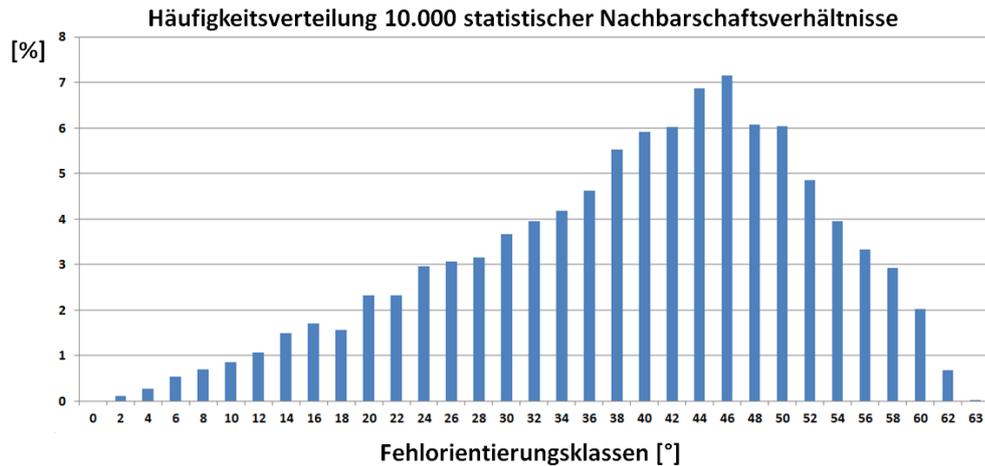


Abb. 6-10: Mackenzie-Plot von 10.000 statistisch berechneten Nachbarschaften

Da die Häufigkeit des Auftretens der einzelnen Fehlorientierungswerte nicht gleichverteilt ist, ergibt sich der typische Verlauf eines Mackenzie-Plots. Da im Folgenden jedoch eine Zuordnung zwischen Fehlpassung und Fehlorientierung angestellt werden soll, reicht es also, dass jede Fehlorientierung lediglich einfach gewertet wird. Diese lässt sich realisieren, indem man aus den 10.000 Fehlorientierungen eine Untergesamtheit, extrahiert. Auf der Basis von dann noch 820 Nachbarschaften beruht die nachfolgend abgebildete Darstellung.

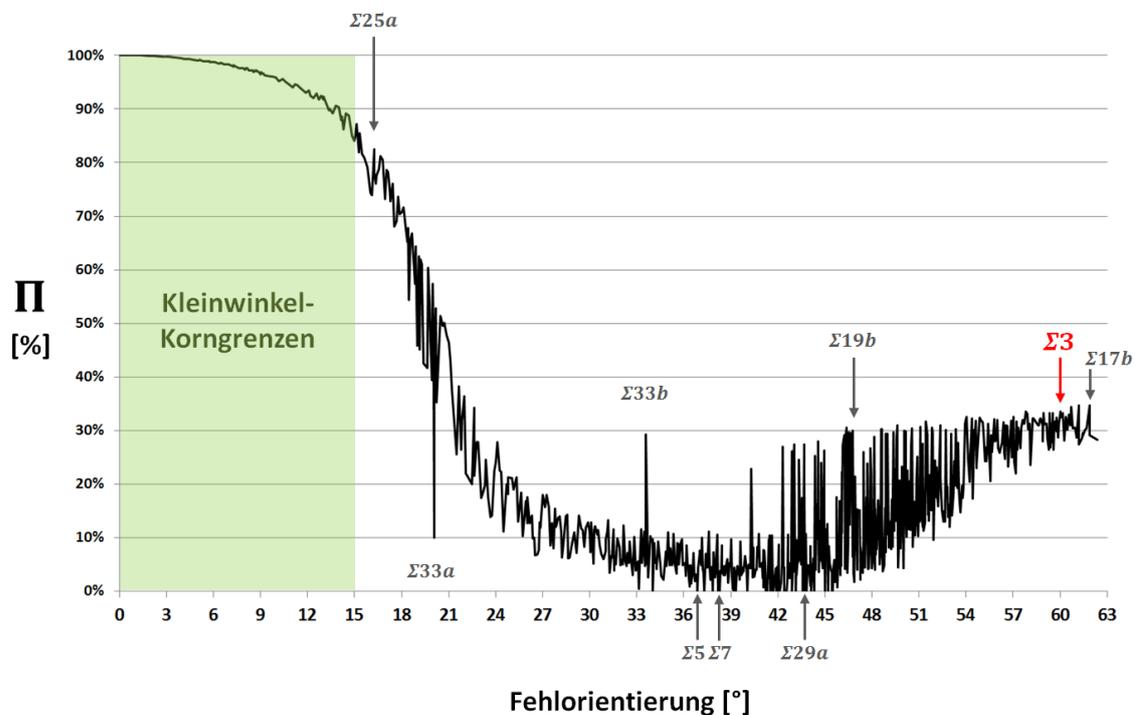


Abb. 6-11: Fundamentale Passung  $\Pi$  von 820 simulierten Nachbarschaften, aufgetragen über deren Fehlorientierung

Bei Betrachtung des Diagramms aus Abb. 6-11 fällt sofort auf, dass der charakteristische Verlauf aus Abb. 6-9 sehr gut reproduziert wird. Gleichwohl ist auch hier, insbesondere im Bereich zwischen etwa  $42^\circ$  und  $55^\circ$  eine starke Fluktuation der einzelnen Passungswerte auszumachen. Einige, aber nicht alle dieser lokalen Extrema lassen sich wiederum mit CSL- $\Sigma$ -Beziehungen in Zusammenhang bringen. Unabhängig von dieser empfindlich mit der Fehlorientierung zusammenhängenden Variation der Passungswerte, lässt sich erkennen, dass die Passungen ab etwa  $45^\circ$  im Mittel insgesamt wieder einen Anstieg verzeichnen, wie das folgende Diagramm verdeutlicht.

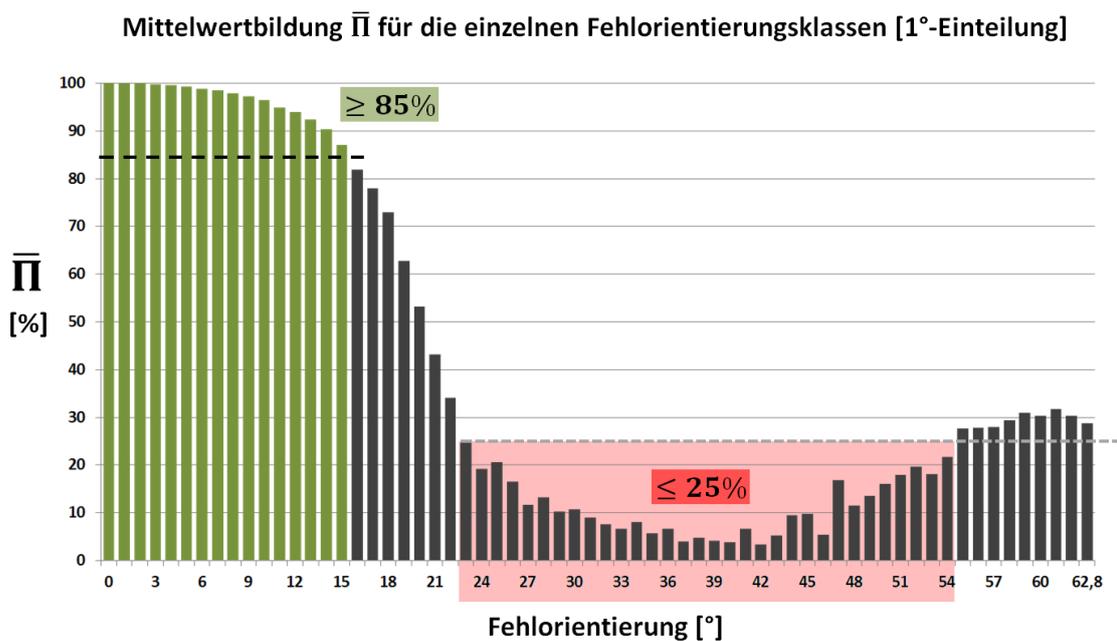


Abb. 6-12: Reproduktion des grundsätzlichen Kurvenverlaufs aus Abb. 6-11 durch Mittelung der Passungswerte mit  $1^\circ$ -scharfer Unterteilung.

Die Quintessenz dieser Darstellung, welche die in Abb. 6-11 sichtbaren Fluktuation durch Mittelwertbildung praktisch glättet, ist der sich grundsätzliche abzeichnende Kurvenverlauf. Beginnend bei einer Fehlorientierung von  $0^\circ$  (also dem Pseudo-Fall identischer Nachbarn) mit einer perfekten Passung von 100 % sinkt dieser Wert auf 85 % für eine Missorientierung von  $15^\circ$ . Dieser in der Literatur übliche Wert zur Abgrenzung von Kleinwinkel- zu Großwinkelkorngrenzen lässt sich mit dem im Rahmen dieser Arbeit gezeigten Resultat mit einem einprägsamen Merksatz verbinden:

**Bei  $15^\circ$  Fehlorientierung ist die Passung  $\Pi$  um 15 % abgefallen.**

Für größere Fehlorientierungen fällt  $\Pi$  dann rapide ab. In dem bereits identifizierten breiten Spektrum zwischen (hier)  $23^\circ$  und  $54^\circ$  liegen die mittleren Passungswerte unterhalb von 25 % und verlaufen erst wieder ab  $55^\circ$  Fehlorientierung oberhalb dieser Grenze.

Durch diese Mittelung, die der Veranschaulichung der grundsätzlichen Verlaufstendenz dienen sollte, gehen die (teilweise in Verbindung mit CSL- $\Sigma$ -Beziehungen) charakteristischen Peaks natürlich verloren. Um dies zu kompensieren soll die folgende Darstellung einen detaillierten Blick auf das ausschließliche Passungsverhalten der CSL- $\Sigma$ -Beziehungen erlauben.

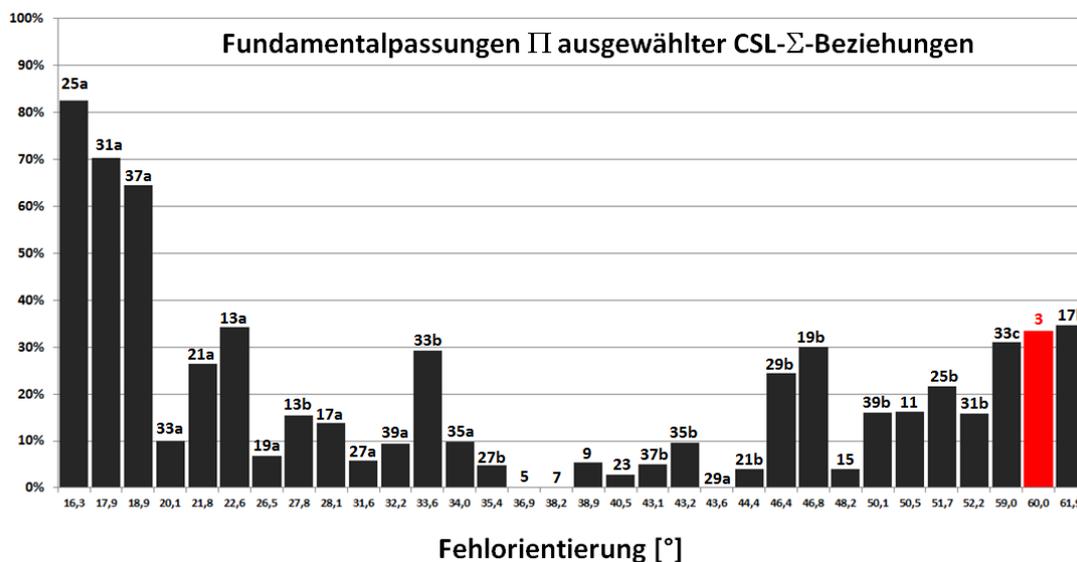


Abb. 6-13: Passungswerte von 32 ausgewählten CSL- $\Sigma$ -Beziehungen

Trotz der stellenweise starken Fluktuation der einzelnen Höhe der Balken lässt sich dennoch auch in diesem Schaubild der grundsätzliche Kurvenverlauf, wie er sich in Abb. 6-12 darstellt, wiedererkennen. Besonders ins Auge sticht, dass gewisse  $\Sigma$ -Werte zu äußerst schlechten Passungen führen (5, 7 und 29a), andere hingegen zu verhältnismäßig guten Werten (25a, 31a, 37a, 13a, 33b, 19b, 33c, 3 und 17b), sofern man ca. 30 %, welche von der Zwillingbeziehung erreicht wird als Maßstab heranzieht. Dass eine Passung von 30 % auch bei einer Nicht-Zwillingkorngrenze zu einer Transmission von Gleitung führen kann, bestätigt ein Vergleich mit den Arbeiten von Zhan et al. bzgl.  $\Sigma$ 19b Korngrenzen. Dort wurde der Transfer von persistenten Gleitbändern (PSBs) durch solche Korngrenzen (mit einer Missorientierung von  $46,8^\circ$ ) beobachtet, wie die nachfolgende Abb. 6-14 zeigt. Man beachte, dass an dieser Stelle sämtliche Randbedingungen, wie der in diesem Fall konkreten Gleitsystemkopplung, der Schmidfaktoren, sowie der Korngrenzenlage völlig außer Acht gelassen werden und sich die vorhergesagte Tendenz zur Transmission somit alleine aus der fundamentalen Passung ableitet.

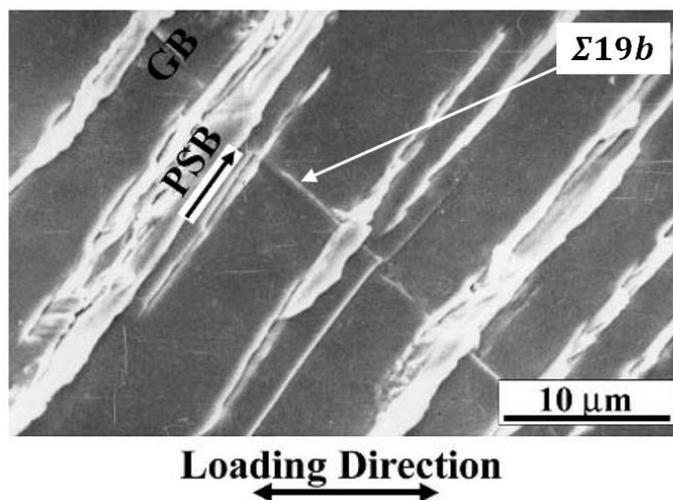


Abb. 6-14: Gleittransfer eines persistenten Gleitbandes durch eine  $\Sigma 19b$  Korngrenze (Missorientierung  $46,8^\circ$ ) [Zhan03]

Im Fall der  $\Sigma 3$ -Zwillingsbeziehung wird dieser Umstand noch deutlicher. Hier hat die Definition der fundamentalen Passung ebenso zur Konsequenz, dass mögliche Charakteristika wie Kohärenz und Inkohärenz der Korngrenzen(lage) nur implizit berücksichtigt werden, da die Fundamentalpassung ja über alle möglichen Korngrenzenorientierungen mittelt. Sie stellt die Bewertung dieser speziellen Korngrenzen somit auf eine schlechtere Basis, als eigentlich möglich. Denn selbst bei einem inkohärenten Verlauf einer Zwillingskorngrenze kommen in der Regel nicht automatisch alle denkbar möglichen Korngrenzenkonfigurationen in Betracht. Es ist vielmehr so, dass Abweichungen von dem geradlinigen kohärenten Korngrenzenverlauf durch eine lokale Facettierung der Korngrenzenfläche bewirkt werden, wie das folgende Beispiel in Abb. 6-15 verdeutlichen soll. Auch wenn sich auf einer inkohärenten (112)-Korngrenzenebene die benachbarten Gleitebenenpaare unsymmetrisch schneiden, also deren Schnitte mit der Korngrenze nicht ineinander fallen, so bleibt die Pseudo-Passung der gemeinsamen Symmetrieebene dennoch erhalten. Erfolgt die Gleitung auf dieser Ebene, so stellt ein inkohärenter Korngrenzenabschnitt folglich keine Barriere dar, wie in Abb. 6-15 zu erkennen ist.

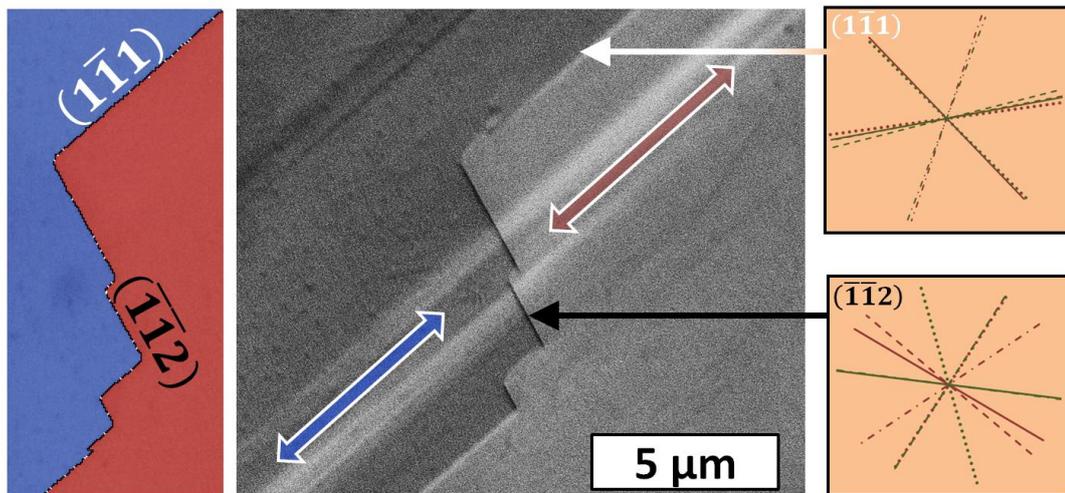


Abb. 6-15: Gleittransmission durch einen inkohärenten Abschnitt  $(\bar{1}\bar{1}2)$  einer Zwillingskorn-  
grenze (GB 69 in Probe 3)

Nachdem nun in diesem Diskussionsabschnitt mit der Entwicklung des Begriffs der fundamentalen Passung eine sehr allgemeine Größe eingeführt worden ist, welche den grundsätzlichen Charakter einer Korngrenze, wohlgermerkt in Korrelation mit der konventionellen und vertrauten Fehlorientierungseinteilung, zum Ausdruck bringen soll, bedarf die Beschreibung von Schädigungsmechanismen infolge von Gleitsystemfehlpassungen wiederum eine detailliertere Betrachtung unter Bezugnahme konkreter Orientierungsinformationen bezüglich der tatsächlichen Korngrenzenlage.

Deshalb wird im Fokus des nachfolgenden Diskussionsteils wieder maßgeblich der explizite Einfluss der Korngrenzenorientierung stehen.

### 6.3 Versetzungsmechanismen und Schädigung im Spezialfall der Zwillingskorn- grenzen

Der Grund warum das Thema Schädigung so oft in Zusammenhang mit Zwillingskorn-  
grenzen steht, beinhaltet gleich mehrere Komponenten. Allen voran stehen die mit der Zwillings-  
symmetrie verbundenen Eigenschaften. Beide Nachbarkristallite besitzen eine  
gemeinsame Gleitebene und die benachbarten, sich schneidenden Gleitebenenpaare  
führen im Kohärenzfall jeweils zu einer bestmöglichen Passung, während die sozusagen  
„Nichtpaare“ maximal ungünstig zusammenfallen. D.h. also, dass bei ein und der-  
selben Nachbarschaft, nämlich dem Zwillings, potentiell beide extremalen Ausprägungen  
der Gleitsystemkompatibilität bzw. -inkompatibilität vorzufinden sind. Es ist dieser be-  
sondere Umstand der vermutlich zu erklären vermag, warum in der Literatur den Zwill-

lingskorngrenzen, je nach Kontext, oftmals gegenläufige Eigenschaften beigemessen werden. Dass letztlich die Frage entscheidend ist, welche der möglichen Gleitsystemkopplungen maßgeblich in Erscheinung tritt, wurde im Ergebnisteil bereits ausführlich dargelegt. Um nun neben der Ursache, also der Frage der Kompatibilität, auch ein Stück weit die Wirkweise des eigentlichen Schädigungsprozesses zu beleuchten, sollen im Folgenden die aufgrund der Gesamtgeometrie möglichen Versetzungs(kopplungs)-Mechanismen im Detail behandelt werden.

Ausgehend von dem Szenario, dass bspw. in einem Korn A aufgrund der Schmidfaktorverteilung ein bestimmtes Gleitsystem (vgl. Abb. 6-16 roter Pfeil  $\vec{R}_1$ ) aktiv ist, welches nicht innerhalb der gemeinsamen Zwillingsene liegt, ergeben sich grundsätzlich sechs verschiedene geometrische Versetzungsreaktionen, wie sie nachfolgend schematisch abgebildet sind.

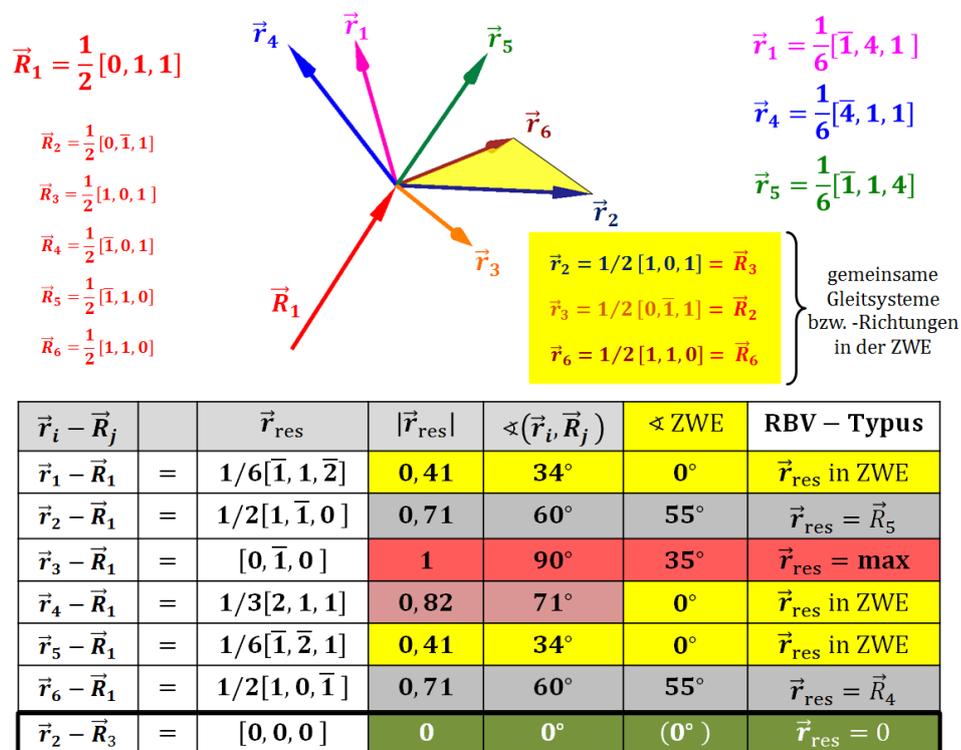


Abb. 6-16: Klassifizierung der möglichen Gleitrichtungskopplungstypen nach Analyse der Restburgersvektoren  $\vec{r}_{res}$  (RBV), deren Beträge, sowie ihrer Lage zur gemeinsamen Zwillingsenebene.

Die zu dem Pfeilschema korrespondierenden Zahlenwerte werden durch die darunterstehende Tabelle repräsentiert. Die ersten sechs Zeilen der Tabelle erfassen die sechs genannten Kopplungsreaktionen, die einem „ankommenden“ Burgersvektor  $\vec{R}_1$  aus Korn A zur Verfügung stehen. In den Spalten sind die dazugehörigen Restburgersvektoren, deren Beträge, der von den beteiligten Richtungen eingeschlossene Winkel, sowie der Winkel des Restburgersvektors zur Korngrenze aufgelistet. Die Spalte ganz rechts ent-

hält eine Typisierung, welche den Charakter der jeweiligen Versetzungsreaktionen zum Ausdruck bringen soll.

Die Lesart der Tabelle sei anhand eines Beispiels, z.B. Zeile 1, erläutert: Die Kopplung von  $\vec{R}_1 = 1/2[011]$  mit  $\vec{r}_1 = 1/6[\bar{1}41]$  aus Korn B, wobei  $\vec{r}_1$  gerade der gemäß der Zwillingsorientierung transformierten Richtung  $\vec{R}_1$  entspricht, führt (da beide Richtungen nicht identisch sind und einen Winkel von etwa  $34^\circ$  einschließen) zu einem Restburgersvektor (bestehend aus der Differenz der beiden Vektoren) von  $\vec{r}_{\text{res}} = 1/6[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ . Dieser Restburgersvektor entspricht genau einer Partialversetzung, wie sie konkret in der Zwillingsene vorliegt und deshalb auch keinen Winkel zur Zwillingsene einschließt. Die Betrachtung der restlichen Zeilen fördern andere charakteristische Kombinationen zu Tage. Die siebte und letzte Zeile ergänzt die sechs vorhergehenden Reaktionen um den Typus der Quergleitung (Cross-Slip), der nur zustande kommen kann, wenn die ankommende Gleitrichtung einer gemeinsamen Gleitrichtung der Zwillingsene entspricht, der Restburgersvektor also zu Null wird. Verzichtet man nun auf eine Einschränkung bzgl. der ankommenden Gleitrichtung (wie sie in diesem Beispiel lediglich zwecks besserer Anschaulichkeit vorgenommen wurde), so kommen insgesamt  $6 \times 6$ , also 36 mögliche Versetzungsreaktionen in Betracht, die sich ihrerseits genau einem Typus zuordnen lassen, wie sie in der rechten Spalte ausgewiesen sind. Die folgende Abbildung soll überdies den Umstand verdeutlichen, dass die einzelnen Typen mit einer symmetriebedingt unterschiedlichen Häufigkeit vorliegen.

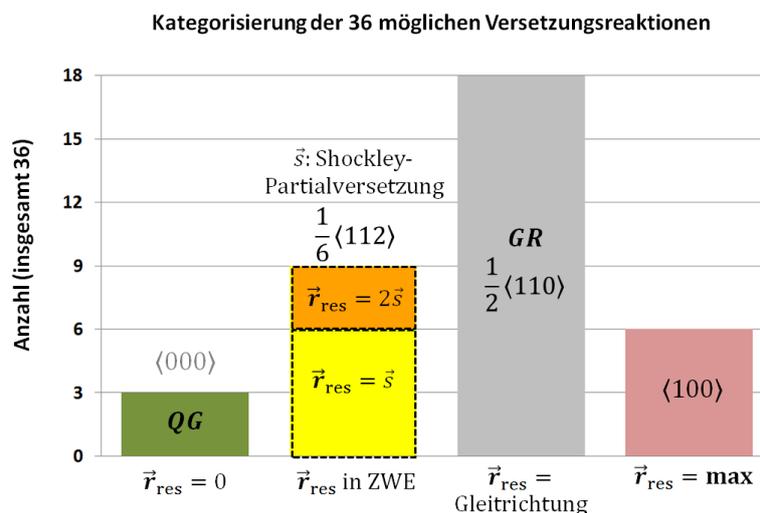


Abb. 6-17: Klassifizierung der 36 möglichen geometrischen Versetzungsreaktionen

Quergleiten (QG, grün) können nur die drei korrespondierenden Gleitebenenpaare. Insgesamt neun Reaktionen hinterlassen einen in der Zwillingsene liegenden Restburgersvektor, der entweder einer einfachen ( $\vec{s}$ ) bzw. einer doppelten Shockley-Partial-

versetzung ( $2\vec{s}$ ) entspricht (gelb/orange). Die sechs Reaktionen, der mit  $90^\circ$  maximal auseinanderliegenden Gleitrichtungen führen zu den somit ebenfalls maximalen Restburgersvektorbeträgen mit einem Betrag von 1 (rot). Die restlichen 18 Kopplungen erfolgen unter Bildung von Restburgersvektoren, welche den  $\langle 110 \rangle$ -Gleitrichtungen (GR, grau) entsprechen. Hierunter fallen natürlich auch die Kopplungen der drei gemeinsamen, in der Zwillingssebene liegenden Gleitrichtungen.

Ziel dieser Klassifizierung in fünf verschiedene Kategorien soll eine weitere und verfeinerte Unterteilung der bereits im Ergebnisteil präsentierten Unterscheidung zwischen Quergleitung, Gleitung parallel bzw. in der Zwillingssebene, sowie der blockierten Gleitung sein, um den eventuellen Zusammenhang zwischen Schädigung und Fehlpassung noch detaillierter zu analysieren. Wendet man dies auf den untersuchten Bereich (vgl. Abb. 6-18 links) an, so ergibt die einzelne Untersuchung der in Frage kommenden Versetzungsreaktionen, dass die Fehlpassung bei drei der fünf bereits identifizierten Zwillingskorngrenze nicht zwangsläufig mit der Tendenz einer Schädigung einhergehen muss, da die (theoretisch) relevanten Restburgersvektoren keinerlei Verschiebung senkrecht zur Korngrenze liefern.

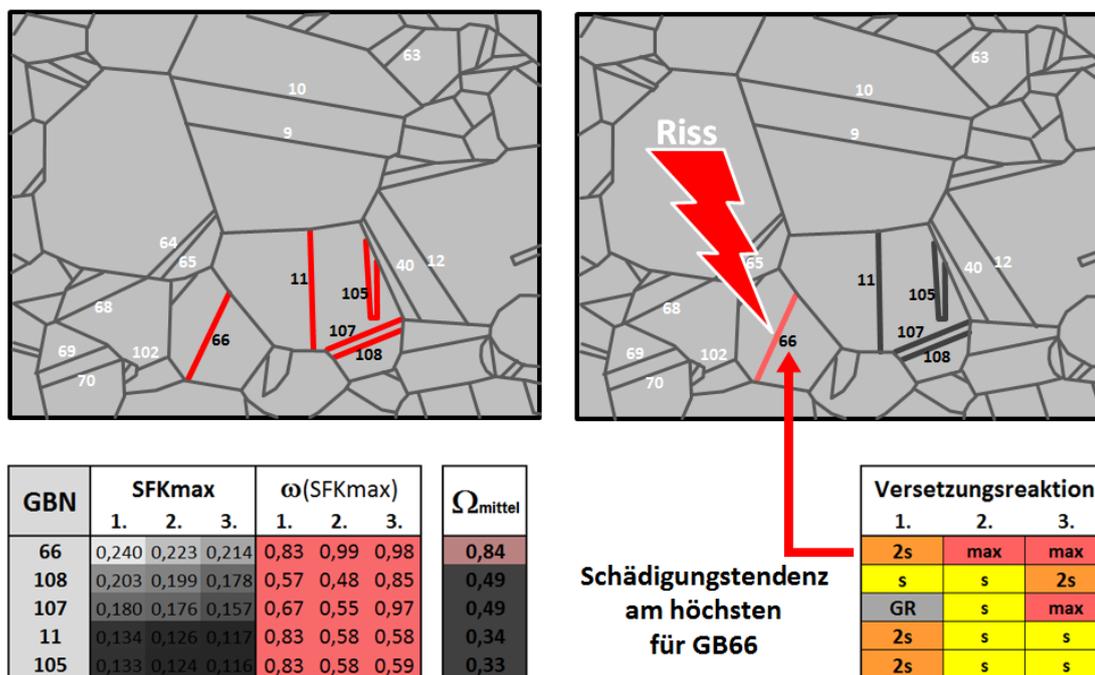


Abb. 6-18: Charakterisierung der Versetzungsreaktionen an den bereits als blockierend identifizierten Zwillingskorngrenzen und Bewertung der Schädigungstendenz

Das Gegenteil ist der Fall an der Zwillingskorngrenze Nr. 66. Dort bewirken die zweite und dritte hauptaktive Kopplung jeweils einen betragsmäßig maximalen Restburgersvektor, der zudem  $35^\circ$  aus der Korngrenzenebene herausragt. Außerdem bedingt der

Restburgersvektor der ersten hauptaktiven Kopplung, gemäß seiner Klassifizierung als  $2\vec{s}$ -Typ eine starke Verschiebung parallel bzw. innerhalb der Zwillingssebene. Unabhängig von der Frage, ob und wie die tatsächlichen Versetzungsmechanismen in der Realität ablaufen, lässt sich dennoch festhalten, dass die im Rahmen der Diskussion ergänzend angestellten geometrischen Betrachtungen der Versetzungsreaktionen, speziell der Kategorisierung der dabei bewirkten Restburgersvektoren, eine weitere Eingrenzung dieser betreffenden Korngrenze, hinsichtlich ihrer (geometrischen) Schädigungstendenz zu leisten vermag.

Im Endergebnis kann nun die im Grundlagenteil aufgegriffene Frage – „*Twin boundaries: Strong or weak?*“ – mit den im Rahmen dieser Arbeit erbrachten Erkenntnissen und Resultaten wie folgt beantwortet werden:

Da die infolge der Zwillingsbeziehung vorliegenden geometrischen Gegebenheiten für alle Zwillinge zunächst grundsätzlich gleich sind, müssen es andere Bedingungen sein, welche die individuellen Eigenschaften einer konkreten Zwillingskorngrenze begründen. Diese wären zum einen die räumliche Lage der Korngrenze (kohärent zur symmetrischen Zwillingssebene oder nicht), sowie die lokal herrschende Spannungsverteilung auf den einzelnen Gleitsystemen der beiden Nachbarn. In dem aufgrund seiner Häufigkeit dominanten Fall der kohärenten Zwillingskorngrenze sind es die beiden extremalen Konfigurationen (Quergleitung  $|\vec{r}_{\text{res}}| = 0$  und maximale Blockade  $|\vec{r}_{\text{res}}| = 1$ ), welche die größte Schädigungstendenz zeigen. Wohlgermerkt, obwohl beiden Mechanismen völlig konträre Prozesse zugrunde liegen. Während im vorherig gezeigten Fall der Zwillingskorngrenze GB66 (vgl. Abb. 6-18) ein Aufreißen der Korngrenze infolge der beidseits blockierten Gleitung erfolgt, ist es im gegenteiligen Fall gerade die Möglichkeit zur Transmission (durch Quergleitung), die zur Schädigung führt. Die Quergleitung erlaubt ein beidseitiges Passieren der Korngrenze, was in Summe zu einer verhältnismäßig großen Akkumulation von Gleitung führen kann, die ihrerseits ein Aufreißen des Gleitbandes zur Folge haben kann, wie das folgende Beispiel in Abb. 6-19 zeigen soll.

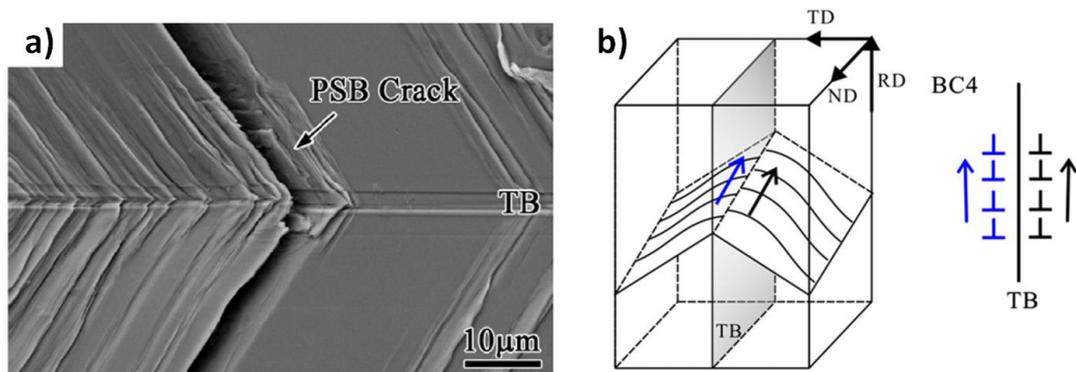


Abb. 6-19: a) Transmission persistenter Gleitbänder (PSBs) durch die Zwillingskorngrenze (TB) und b) schematische Darstellung des Transmissionsprozesses durch Quergleitung [Li13]

Diese Konstellation, in der die Schädigung sozusagen eine Folge der optimalen Passung zweier benachbarter und gleichzeitig aktiver Gleitsysteme ist, stellt bei einem Vergleich mit den in Abb. 6-17 gezeigten möglichen Kopplungsreaktionen eine eher unwahrscheinliche Kombination dar. Die große Mehrheit der denkbaren Konfigurationen findet sich in den Fällen zwischen Quergleitung und maximaler Blockade wieder. Es ist wahrscheinlich der in diesen Fällen „moderate“ Blockierungscharakter, der vermutlich die Eigenschaft bewirkt, welche man mit einer Steigerung der Ermüdungsfestigkeit verbindet. Das Wort „moderat“ soll hier zum Ausdruck bringen, dass zwar infolge der geometrischen Fehlpassung der (fallbezogen) relevanten Gleitsystemkopplungen zunächst die Barrierewirkung im Vordergrund steht, im Falle einer jedoch trotzdem erzwungenen Transmission der Restburgersvektor zumeist so ausfällt, dass dieser mehr oder minder in der Zwillingssebene „eingebaut“ werden kann. Auf diese Weise fällt der damit einhergehende Schädigungsbeitrag (abhängig vom Betrag des Restburgersvektors) möglichst minimal aus, was wiederum, verglichen mit einer allgemeinen Großwinkelkorngrenze, einen Vorteil bedeutet.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass der individuelle Charakter einer Zwillingskorngrenze u.a. bzgl. Ermüdungsfestigkeit (und weiter der Rissinitiierung) in deren geometrischer Konfiguration, einschließlich der Verteilung der Gleitsystemaktivität begründet liegt. Das *STRONG*-Modell und die damit verbundenen Berechnungsmethoden sind in der Lage die verschiedenen Mechanismen, wie Transmission und Blockierung (und evtl. daraus resultierender Rissbildung) durch eine explizite Erfassung des Passungs- bzw. Nichtpassungscharakters der relevanten Gleitsystemkopplungen zu beschreiben.



Die nebenstehende Graphik visualisiert den zugrundeliegenden Kopplungsmechanismus, unter der Annahme, dass der Transferprozess über die geometrisch günstigste Gleitsystemkopplung ( $i = 5, j = 5$  bzw. L4 mit l4) erfolgt. Eine Aktivierung dieser Kopplung ist unter den gegebenen Voraussetzungen jedoch nur unter Beteiligung der beiden zusätzlichen zur Ebene  $l$  (im grünen Korn) gehörenden Gleitrichtungen  $\vec{r}_4$  und  $\vec{r}_2$  zu bewerkstelligen. Dies steht in völligem Einklang zu Schäfs Feststellung, dass der Riss-transfer über die Korngrenze letztlich von dem Gleitsystem mit der geringsten Schubspannung dominiert wird, in diesem Fall das Gleitsystem  $l2$  mit einem Schmidfaktor von 0,025. Diese bemerkenswerte Übereinstimmung kann als weiteres Indiz für die Konsistenz des Modells des geometrischen Korngrenzenwiderstandes gewertet werden. Auch wenn der mittels *STRONG* berechnete Widerstandswert mit  $\omega_{5,5} = 0,094$  oberhalb des gewählten Grenzwertes von 0,067 liegt, so ist davon auszugehen, dass es maßgeblich die äußerst gute Passung der Gleitebenenschnitte auf der Korngrenze ( $\alpha = 2^\circ$ ) ist, welche das Stattfinden des Übertritts an sich, sowie insbesondere die Kontinuität des Übergangs begründet. Eine weitere detailliertere Betrachtung des von der Gleitrichtungskopplung erzeugten Restburgersvektors zeigt, dass dessen Betrag trotz des eingeschlossenen Winkels von  $25^\circ$  mit einem Wert 0,37 in etwa halb so groß ist, wie der Betrag einer vollständigen Versetzung. Zudem liegt der Restburgersvektor lediglich in einem Winkel von etwa  $12,5^\circ$  zur Korngrenze, weshalb die in die Korngrenze hineinwirkende Verschiebungskomponente nur gering ausfällt.

#### 6.4.2 Der diskontinuierliche Riss-Transfer

Ein anderer, sozusagen diskontinuierlicher Übergang (vgl. Abb. 6-21), der mit einer, bezogen auf die Rissausbreitungskurve spürbaren Widerstandswirkung verlaufen ist, wurde ebenfalls von Schäf experimentell erfasst. Ein auf der Gleitebene M kristallographisch ankommender Riss passiert die Korngrenze unter Benutzung zweier (innerhalb desselben Kornes) benachbarter Gleitebenen (m und l). Der Blick auf die in der Korngrenze liegenden möglichen Schnittkopplungen (siehe Abb. 6-21 links unten) zeigt, dass alle potentiellen Ebenenkopplungen (bzgl. der ankommenden Rissebene M) mit sehr großen  $\alpha$ -Winkeln weit auseinander liegen. Die zwei „nächsten“ sind die Ebenen m und l. Die hauptaktiven Gleitrichtungen ( $R_5$  und  $r_5$ ) hingegen schließen einen nur verhältnismäßig geringen Winkel von  $16^\circ$  ein (vgl. Abb. 6-21 rechts oben). Im Sinne des geometrischen Korngrenzenwiderstandes ergeben sich für die beiden so identifizierten Gleitsystemkopplungen, M5m5 und M5l5,  $\omega$ -Werte von 0,13 ( $\alpha = 25^\circ$ ) bzw. 0,33 ( $\alpha = 45^\circ$ ). Beide Widerstandswerte liegen deutlich in jenem Wertebereich, dem eine Barrierewirkung zugeordnet wird. Dies steht zunächst zumindest qualitativ mit der Beobachtung, dass die Rissausbreitung durch die Korngrenze stark verlangsamt wurde, wenngleich es schließlich doch zu einem (diskontinuierlichen) Riss-transfer kam.

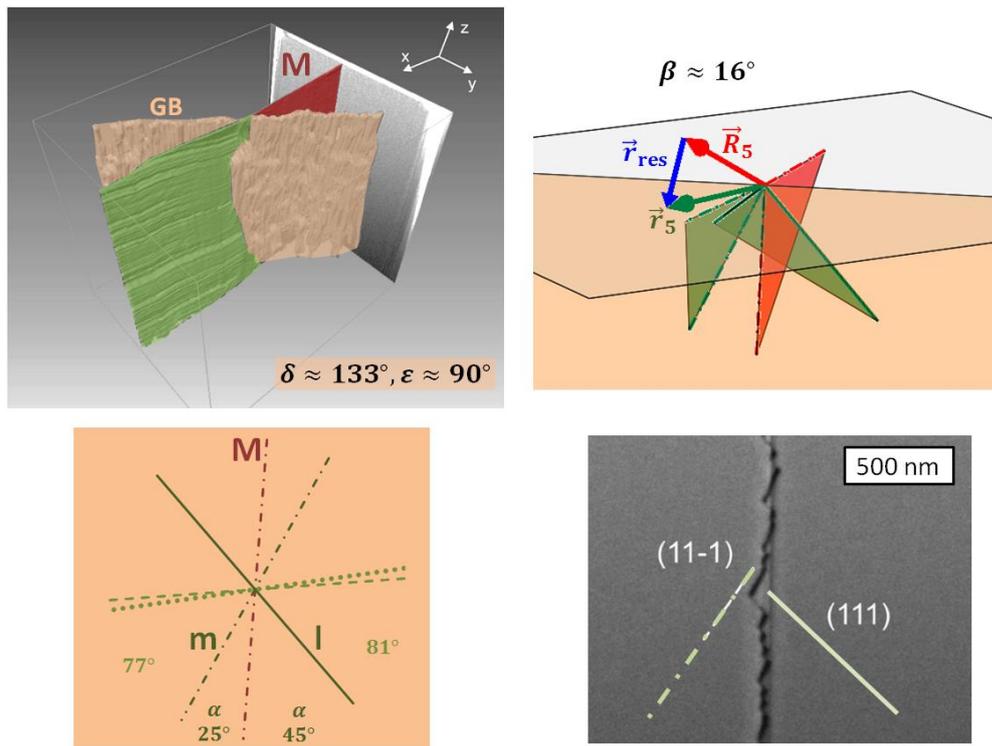


Abb. 6-21: (links oben) FIB-Tomographie [Schäf10] diskontinuierlicher Riss-Transfer, (rechts oben) Visualisierung der geometrischen Konfiguration, (links unten) Schnittkopplungen in der Korngrenzebene, (rechts unten) Zick-Zack-Verlauf des Risspfades infolge der alternierenden Benutzung zweier Gleitsysteme

Eine Erklärung hierfür bietet möglicherweise der Umstand, dass anders als beim ersten (kontinuierlichen) Mechanismus, in hiesigem Fall die gute Passung der beteiligten Gleitrichtungen einen dominierenden Einfluss zu haben scheint. Überdies liegt hier die Besonderheit vor, dass sich die Gleitrichtung  $r_5$  gleichzeitig beiden Gleitebenen  $m$  und  $l$  gemeinsam ist, der Burgersvektor also theoretisch zwischen beiden Ebenen quergleiten kann. Welche (Versetzung-)Mechanismen sich tatsächlich abspielen bleibt an dieser Stelle unbekannt. Unbeachtlich dessen kann eine Betrachtung, welche weiteren geometrischen Rahmenbedingungen vorliegen, wie bspw. der Restburgersvektoren, hingegen durchaus angestellt werden. Eine Analyse des betragsmäßig kleinen Restburgersvektors ( $\vec{r}_{\text{res}} = \vec{r}_5 - \vec{R}_5$ ) ergibt eine verhältnismäßig gute Einpassung in Korngrenzebene ( $14,2^\circ$ ), was ein weiteres Indiz dafür ist, dass das Passieren des Risses durch Stufenbildung nahezu ohne weitere sonstige Beiträge erfolgen kann.

Den gesamten Riss-Transfer resümierend kann konstatiert werden, dass der Riss die Korngrenze zwar unter Verlangsamung, jedoch auch unter annähernder Beibehaltung seiner ursprünglichen Flucht passiert, indem er, um eben diese Fluchtlinie zu erhalten, zwei benachbarte Gleitebenen aktiviert, deren Gemeinsamkeit darin besteht, dass die für beide Gleitsysteme optimale Gleitrichtungskopplung verwendet wird.

### 6.4.3 Einfluss des Restburgersvektors

Nach Betrachtung dieser beiden Übergangsmechanismen und natürlich unter Einbeziehung der gewonnenen Erkenntnisse sollen im Folgenden zwei charakteristische Riss-Korngrenze-Wechselwirkungsstellen des im Ergebnisteil vorgestellten Risses (vgl. Abb. 5-34, Step 7) untersucht werden. Auch hier gilt es die Frage zu stellen, welchen Einfluss die Lage der Korngrenze neben der geometrischen Gleitsystempassung womöglich auch in Bezug auf den Restburgersvektor hat. In der siebten Schleifstufe (vgl. Abb. 5-36) wurde z.B. für beide Korngrenzenabschnitte, sowohl auf der linken, als auch auf der rechten Seite, der gleiche Korngrenzenwiderstand (beide etwa  $\omega \approx 0,035$ ) berechnet und trotzdem zeigte die linke Grenze (Stelle 8) eine stärkere Barrierewirkung als die rechte (Stelle 13). Um nun den möglichen Einfluss des in beiden Fällen identischen Restburgersvektors zu untersuchen, soll dessen Einpassung in der an beiden Stellen hingegen unterschiedlichen Korngrenzenorientierungen berechnet werden, wie die folgende Schematik veranschaulichen soll.

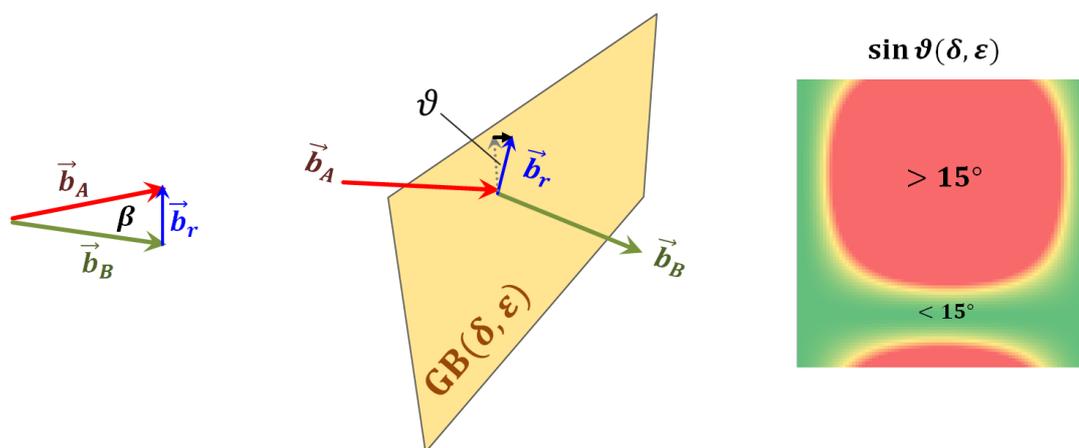


Abb. 6-22: Berechnung der „Passung“ des Restburgersvektor in die Korngrenzenebene anhand des Winkel  $\vartheta$  zwischen Restburgersvektor und Korngrenze. Die Kachel (rechts) zeigt die Variation dieser Passung in Abhängigkeit der Korngrenzenparameter  $(\delta, \epsilon)$ .

Im Sinne einer auch für andere Fällen anwendbare Berechnung bietet es sich an diesen Winkel zwischen Restburgersvektor und Korngrenzenebene für zunächst alle möglichen Korngrenzenorientierungen zu berechnen, wie in obigem Schema gezeigt. Die Farbcodierung beruht wieder auf einer 15°-Konvention. Eine Verknüpfung von Gleitsystemkopplung und der Passung des Restburgersvektors *RBV* kann nun durch eine komponentenweise Multiplikation der beiden entsprechenden Felder erfolgen, wie in Abb. 6-23 durchgeführt. Als Ergebnis erhält man die rechts abgebildete Kachel, deren Farbverlauf der gleichen immer wiederkehrenden Logik dieser Arbeit gehorcht – grün ist im Sinne der geometrischen Passung „gut“ und rot ist „schlecht“. Der nun relevante Bereich (grün-gelb) weist jene Korngrenzenkonfigurationen aus, die neben einer guten

Passung der Gleitsysteme gleichzeitig auch eine gute Einpassung des betreffenden Restburgersvektors in die Korngrenze gewährleisten.

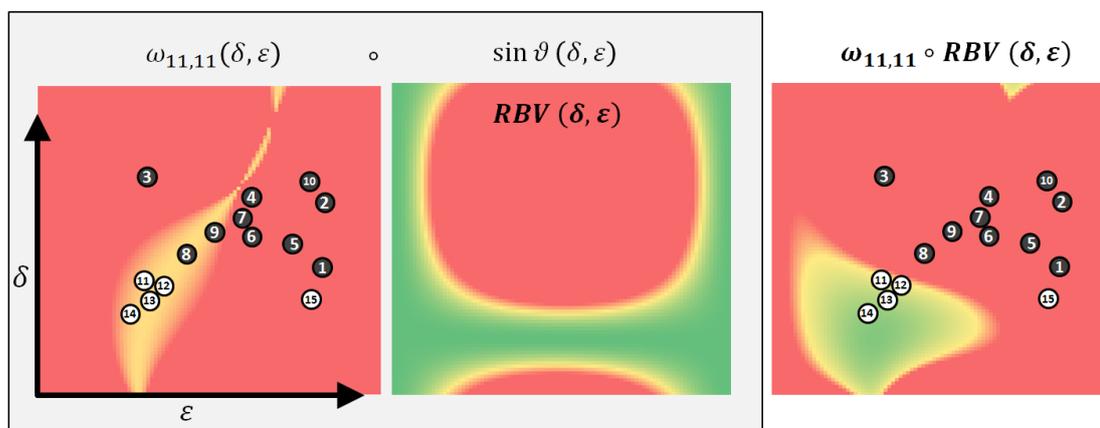


Abb. 6-23: Die Berücksichtigung der „Einpassung“ des Restburgersvektors in die Korngrenze führt zu einer genaueren Eingrenzung der tatsächlichen Transmissionsaffinität

Durch diese neue Eingrenzung der 15 analysierten Wechselwirkungspunkte verbleiben vier Korngrenzkonfigurationen, 11, 12, 13 und 14, in dem als transmissionsaffinen ausgewiesenen Bereich, was in besserem Einklang mit dem Experiment steht, als bei der vorherigen Einteilung ohne Berücksichtigung der Lage des Restburgersvektors (vgl. linke Kachel in Abb. 6-23). Die Punkte 8 und 9, welche zuvor trotz guter Gleitsystempassung doch nur eine spärliche bis gar keine Tendenz zur Gleittransmission zeigten, liegen nun deutlich im roten Bereich. Dieses Resultat kann als weiteres Indiz für den nicht zu vernachlässigenden Einfluss des Restburgersvektors (für die Rissausbreitung durch Korngrenzen) herangezogen werden. Natürlich muss an dieser Stelle erwähnt werden, dass diese sehr detaillierte Betrachtung des hier eingeführten Begriffs der Einpassung deshalb nötig (und auch nur hier sinnvoll) ist, da speziell in diesem Beispiel die rein betragsmäßige Erfassung des Restburgersvektors alleine nicht ausreicht, um die beiden unterschiedlichen Transmissionswirkungen der Wechselwirkungsstellen 8 und 13 zu erklären, weil dieser in beiden Fällen identisch ist und somit auch den gleichen Betrag hat.

In allgemeineren Fällen sollte die betragsmäßige Berücksichtigung der Restburgersvektoren (wie sie in dieser Arbeit implizit durch den Winkel  $\beta$  gemacht wird) ausreichen, wobei es zu bedenken gilt, dass deren Einpassung de facto umso unbedeutender wird, je kleiner die Beträge ausfallen. Eine Korrelation zwischen dem Transfer von Gleitung durch Korngrenzen mit der Größe des Restburgersvektors findet sich u.a. in den Arbei-

ten von Abuzaid et al. [Abuz12b]<sup>71</sup>. Sie zeigen, dass die über die Korngrenze hinweg akkumulierte Dehnung (infolge der Transmission von Gleitung) umso größer ausfällt, je geringer die Beträge der Restburgersvektoren sind, wie das folgende Diagramm demonstrieren soll.

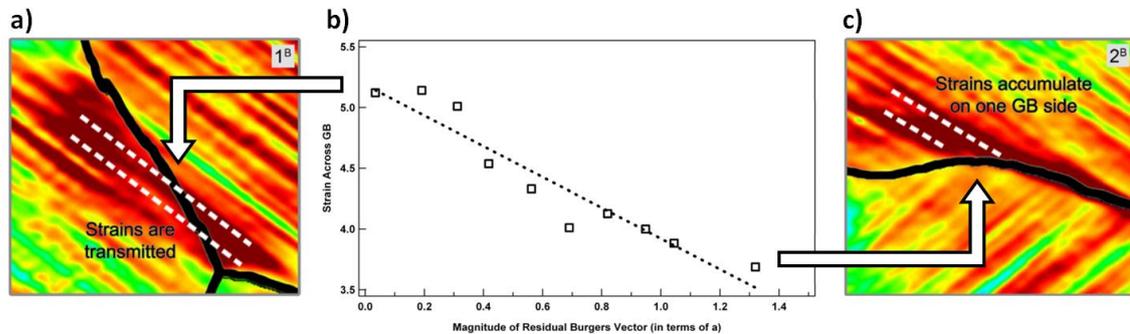


Abb. 6-24: Diagramm (b): Auftragung der über die Korngrenze hinweg akkumulierten Dehnung in Abhängigkeit vom Betrag des Restburgersvektors [Abuz12b]. a) und c) Visualisierung der Dehnung mittels DIC-Messungen [Patr13]<sup>72</sup>.

Im Ergebnis lässt sich also festhalten, dass der für das Auftreten von Gleittransferprozessen so entscheidende Einfluss des Restburgersvektor-Betrages sich mit den Ergebnissen dieser Arbeit nicht nur bestätigen lässt, sondern dessen besondere Rolle bezogen auf die zusätzliche Betrachtung der „Einpassung“ in die Korngrenze überdies unterstreicht.

<sup>71</sup> „Slip Transfer and plastic strain accumulation across grain boundaries in Hastelloy X“ W.Z. ABUZAIID, M.D. SANGID, J.D. CARROLL, H. SEHITOGLU, J. LAMBROS, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (2012) 1201-1220

<sup>72</sup> „Slip transmission in bcc FeCr polycrystal“ L. PATRIARCA, W. ABUZAIID, H. SEHITOGLU, H.J. MAIER, *Materials Science & Engineering A* 588 (2013) 308-317

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

### 7.1 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit hat gezeigt, dass die Vorstellung, dass eine nach dem konventionellen Begriff der Missorientierung (zweier benachbarter Kristallkörner) als Großwinkelkorngrenze eingestufte Korngrenze, per se als Barriere zu interpretieren sei, nicht zutreffend ist. Denn sowohl bei der Ausbreitung lokaler Kristallplastizität (Gleitung durch Versetzungsbewegung), als auch dem Fortschreiten eines mikroskopischen Risses (Stage I), sind es eben nicht die benachbarten Kristall(gitter)orientierungen in Gänze, die miteinander in Wechselwirkung treten, sondern eine (darin beinhaltete) Auswahl dezidierter Gleitsysteme. Nämlich explizit jene, die z.B. bereits (in einem Nachbar) aktiv sind und dann „auf der Korngrenze“ potentiell auf ein ähnlich orientiertes Gleitsystem des benachbarten Korns treffen oder eben nicht. Und genau dieser Umstand ist es, der letztlich entscheidet, ob der betreffenden Korngrenze (stets in Abhängigkeit der äußeren Rahmenbedingungen) ein Transmissions- oder bzw. umgekehrt ein Barrierecharakter attestiert werden kann.

Basierend auf dieser Erkenntnis liegt der Fortschritt dieser Arbeit darin, zunächst von dem klassischen Begriff der (Kristall-)Fehlorientierung abzurücken, um diesen gleichzeitig durch eine detaillierte Analyse der Passung aller potentiell miteinander koppelnden (benachbarten) Gleitsysteme zu ersetzen. Die im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich untersuchte kubisch flächenzentrierte Kristallsymmetrie, mit ihren je Kristall 12 charakteristischen Gleitsystemen, hat zur Folge, dass grundsätzlich 144 mögliche Gleitsystemkombinationen denkbar und somit auch Gegenstand der Betrachtung sind. Deren individuelle Passung setzt sich wiederum zusammen aus der Passung der korrespondierenden Gleitrichtungen, sowie jener der beteiligten Gleitebenen. Während erstere tatsächlich nur von der Fehlorientierung der Nachbarkristallite abhängt, kann die Passung zweier Ebenen (verschiedener Kristalle) stets nur in Bezug zur Lage der Korngrenze ausgedrückt werden. Genau dieser Sachverhalt begründet, die zwar bereits bekannte, wenngleich auch noch nicht weitreichend etablierte Erkenntnis, dass die räumliche Lage der Korngrenze einen so maßgeblichen Einfluss auf die beschriebenen Wechselwirkungsmechanismen hat. Das Hauptproblem hierbei stellt die im Regelfall, teilweise bis völlige Unkenntnis der konkreten lokalen Korngrenzenorientierung dar. Um dieser Unkenntnis zu begegnen, liefert ein probabilistischer Ansatz die Möglichkeit, zunächst

schlicht die Passung aller denkbar in Frage kommenden Korngrenzenkonfigurationen zu berechnen, um dann in einem zweiten Schritt eine Abschätzung zu erlauben, welches Passungsverhalten tendenziell für die jeweiligen Gleitsystemkopplungen zu erwarten ist. Diese Vorgehensweise hat gezeigt, dass ohnehin stets nur eine kleine Auswahl der grundsätzlich 144 potentiellen Kombinationen wirklich für eine Kopplung im Sinne einer geometrisch günstigen Passung in Frage kommt. Und selbst nach dieser starken Eingrenzung bleibt die Frage, welche dieser Kombinationen überhaupt die nötige Gleitsystemaktivität aufweisen, um einen Prozess, wie z.B. der Transmission von Gleitung oder eines Risses zu tragen.

Es ist gerade diese hintereinandergeschaltete Eingrenzungslogik, welche die ursprünglich mit 144 Kopplungen verhältnismäßig große Mannigfaltigkeit letztlich wieder auf eine überschaubare Anzahl reduziert, welche schließlich im Ergebnis zu konkreten Aussagen führt. Diese Aussagen fallen natürlich umso besser aus, je genauer die Kenntnis der Lage der Korngrenze (z.B. deren Verlauf an der Oberfläche oder gar eine 3D-Abschätzung mittels Tomographie) und der lokal herrschenden Spannungsverhältnisse (im Idealfall bezogen auf die einzelnen Gleitsysteme) ist. Doch auch für den Fall, dass keine der genannten Zusatzinformationen herangezogen werden können liefert die im Rahmen dieser Arbeit definierte Größe der sogenannten fundamentalen Passung  $\Pi$  einen maximal reduzierten und somit skalaren Wert, der das grundsätzliche Passungsverhalten eines Korn-zu-Korn-Nachbarschaftsverhältnisses zum Ausdruck bringt. Die Korrelation dieses Wertes mit der korrespondierenden (klassischen) Missorientierung hat gezeigt, dass eine steigende Fehlorientierung eben nicht notwendigerweise mit einem Anstieg der „Fehlpassung“ in Verbindung zu setzen ist. Vielmehr zeichnete sich ab, dass zwar Missorientierungen zwischen  $20^\circ$  und  $50^\circ$  im Allgemeinen zu („fundamental“) schlechten Passungen führen, die Passungseigenschaften für Fehlorientierungen größer als  $50^\circ$  jedoch wieder signifikant ansteigen.

Dass diese Tendenz keinem Zufall entspringt haben auch die Ergebnisse bestätigt, die auf der Basis genauerer Informationen, sowohl bezüglich der Korngrenzenorientierung, als auch der Spannungsverhältnisse, beruhen. Die vielfach beobachtete Transmission von Gleitlinien durch Korngrenzen (insbesondere auch durch Großwinkelkorngrenzen) konnte in der Mehrheit der Fälle auch bei teilweiser Unkenntnis der Korngrenzlage korrekt beschrieben werden.

Noch detailliertere Untersuchungen bezüglich der Abhängigkeit der Korngrenzenorientierung konnten anhand eines tomographierten Rissübergangs über eine Korngrenze angestellt werden. Bei sonst identischer geometrischer Gesamtkonfiguration konnte hierbei der (nahezu) alleinige Einfluss der lokalen Lage der Korngrenzebene untersucht werden. Die damit verbundenen Ergebnisse erlaubten neben einer weiteren Bestätigung des geometrischen Modells weitere ergänzende Betrachtungen bezüglich der bei der Transmission (zumindest in der Theorie) beteiligten Restburgersvektoren.

Eine ebenfalls dezidierte Betrachtung potentieller Versetzungsreaktionen unter Berücksichtigung der dabei resultierenden Restburgersvektoren lieferte die Untersuchung von Gleitprozessen an Zwillingskorngrenzen (deren räumliche Lage im Kohärenzfall bekannt ist). Die im Rahmen dieser Arbeit etablierte, auf die einzelnen Gleitsystemkoppungen heruntergebrochene Betrachtungsweise, war damit imstande, die in der Literatur oftmals zu allgemein und pauschal gefasste Beurteilung bezüglich der ermüdungsfestigkeitssteigernden Wirkung von Zwillingskorngrenzen mit den tatsächlich relevanten Versetzungs-Wechselwirkungsprozessen in Verbindung zu bringen.

Abschließend lässt sich zusammenfassen, dass die Stärke des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten *STRONG*-Konzepts (Slip Transfer Resistance Of Neighboring Grains) und den damit verbundenen Berechnungen, darin liegt, dass der Charakter der im Zentrum der Betrachtung stehenden Korngrenzen soweit als möglich und alleinig auf die geometrischen Gegebenheiten der Gesamtkonfiguration reduziert werden konnte. Denn es sind genau jene Randbedingungen (die Orientierungen der benachbarten Kristalle, der dazwischenliegenden Korngrenze, sowie der Zugachse), welche die lokale Ausprägung von Gleitsysteminteraktionen nicht nur maßgeblich bestimmen, sondern überdies auch experimentell (mehr oder minder) in ihrer direkten Erscheinungsform erfassbar sind. Der letztgenannte Umstand begründet zugleich, warum sich die im Rahmen dieser Arbeit angestellten Spannungsbetrachtungen konsequenterweise auf die einfachste Annahme, einer alleinig aus der Lage der Zugachse resultierende Schmidfaktorverteilung, beschränkte.

Einerseits unterstreicht diese Einschränkung abermals den Charme des *STRONG*-Modells und offenbart andererseits jedoch zugleich dessen größte Schwäche. Durch den Verzicht der Berücksichtigung von lokalen Spannungsbeiträgen (infolge der elastischen Anisotropie, der Inkompatibilitäten und sonstigen Einflüssen) bilden die Inputparameter – Kristall A, Kristall B, Korngrenzenorientierung und Zugachse – zwar einen vollständigen Datensatz, der das betrachtete System im geometrischen Sinne vollumfänglich und geschlossen beschreibt. Der im Gesamtkontext nicht minder relevanten Frage der tatsächlichen Gleitsystemaktivität wird damit jedoch nur in spärlichster Form Rechnung getragen. Deshalb muss es Gegenstand weiterführender Anstrengungen sein, das Konzept der geometrischen Gleitsystempassung, so zu erweitern, dass die für Versetzungsmechanismen ebenso entscheidenden Spannungen ebenfalls eine tiefergehende Berücksichtigung finden.

## 7.2 Ausblick

Weiterführende Arbeiten zur Untersuchung der Barriere-Wirkung von Korngrenzen auf kristallographische Ermüdungsrisse in Nickelbasis-Superlegierungen wurden u.a. im Rahmen zweier Diplomarbeiten durchgeführt, welche in Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit entstanden. Ein Ansatz, welcher die Wechselwirkung von Versetzungen innerhalb der plastischen Zone vor der Rissspitze bei Annäherung an eine Korngrenze in den Vordergrund rückt, wurde in der Diplomarbeit von Florian Schäfer verfolgt. Basierend auf dem BCS-Modell (und in Erweiterung des DFZ-Modells) wurde gemäß dem Spannungskonzept von Tanaka der Versuch unternommen, den Einfluss der Korngrenze durch deren Wirkung auf die plastische Rissspitzenverschiebung (verbunden mit der Versetzungsdichteverteilung innerhalb der plastischen Zone) zu quantifizieren, wie die nachfolgende Abbildung veranschaulichen soll.

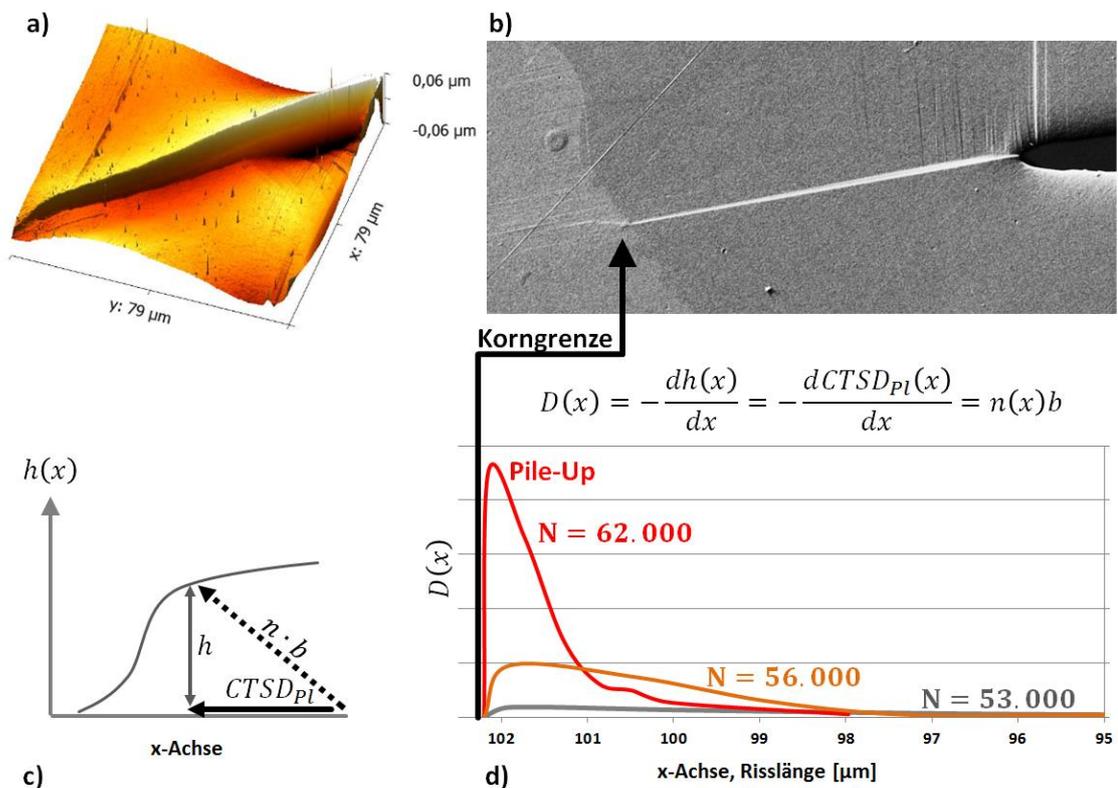


Abb. 7-1: a) AFM-Aufnahme der Gleitbandspitze unmittelbar vor der Korngrenze. b) REM-Aufnahme einer beispielhaften Untersuchungskonfiguration, bestehend aus FIB-Kerbe, Gleitband (plastische Zone) und Korngrenze. c) Schema zur Vermessung des Gleitbandprofils. d) Berechnung der Versetzungsdichte anhand des Gleitbandprofils.

Der Zusammenhang zwischen dem auf diese Weise experimentell quantifizierbaren mikrostrukturellen Spannungsintensitätsfaktor und dem Konzept des geometrischen Korngrenzenwiderstandes wird in einer laufenden Arbeit weiter erforscht.

Eine andere Herangehensweise wurde in der Diplomarbeit von Kerstin Domin angestrebt. Hier wurde (im selben Materialsystem) der Ansatz verfolgt, die Wechselwirkung der plastischen Zone und insbesondere deren quantitative Erfassung mittels digitaler Bildkorrelationsmethoden zu bewerkstelligen. Bei in-situ Ermüdungsexperimenten wurden hochaufgelöste REM-Aufnahmen vor und nach einer Belastung oder auch nach einer Abfolge mehrerer Ermüdungszyklen mit einer Analyse-Software (VEDDAC©) ausgewertet, um die Ausprägung lokaler Dehnungen abzubilden, wie die folgenden Bilder demonstrieren sollen.

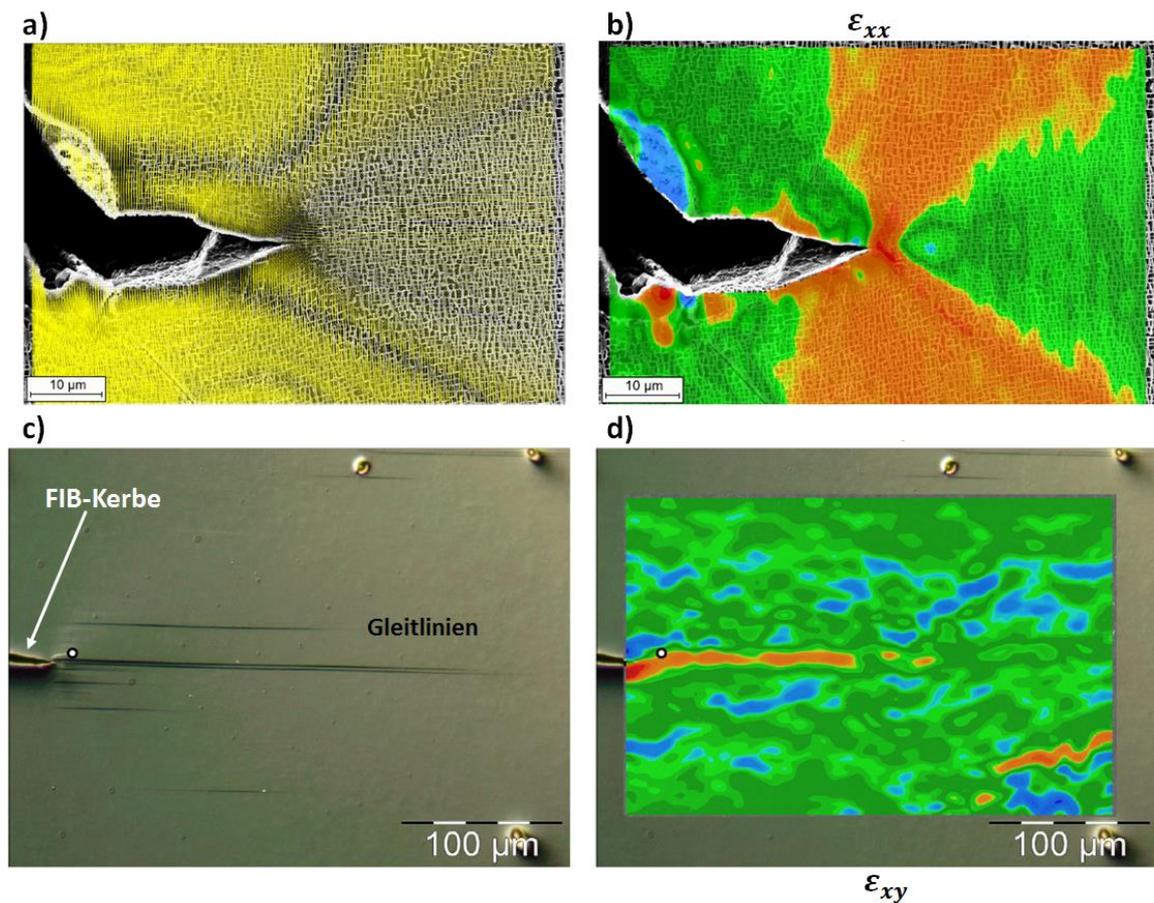
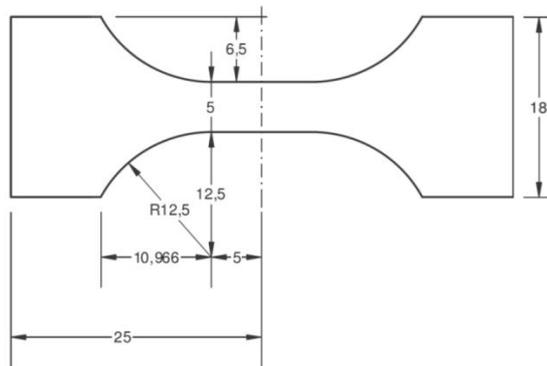


Abb. 7-2: a) Visualisierung der Verschiebungsvektoren (gelb) mittels Bildkorrelation, b) Berechnung der daraus resultierenden Dehnung  $\epsilon_{xx}$ , c) Konzentration der plastischen Zone im Gleitband vor der Rissspitze und d) Sichtbarmachung mittels DIC

Diese Möglichkeit der Visualisierung von u.a. der plastischen Zone weist vielversprechende Perspektiven auf, wenngleich die Methode gerade auf der Mikroebene und bei äußerst geringen Dehnungen noch einige Schwierigkeiten mit sich bringt. Es wird eine sich gegenseitig ergänzende Kombination der einzelnen Sichtweisen (Geometrien, Spannungen, Dehnungen, und auch der energetische Aspekte) sein, welche in Zukunft ein noch tiefergehendes Verständnis für die vielen Effekte bzgl. der Wechselwirkung zwischen Riss und Korngrenze erlauben soll.

## Anhang: Probenherstellung, Präparation und Charakterisierung

Die Proben P1, P2 und P3 wurden aus (5cm x 5cm) Nickelblechen (Firma *Goodfellow*) der Reinheit 99,99+% mittels Funkenerosion in der folgenden Geometrie herausgeschnitten:



Probengeometrie der Nickelflachzugproben P1, P2 und P3

Die Präparation der Oberfläche erfolgte grundsätzlich in zwei Einheiten. Ein (grobes) vorläufige Schleifen (schrittweise 800er, 1200er und 4000er Papier) vor der Wärmebehandlung, sowie eine daran anschließende verfeinerte Abfolge von Schleif- und Politurvorgängen. Hierzu wurde ein eigens auf die Probengeometrie abgestimmter Probenhalter angefertigt, wie die nachfolgende Abbildung zeigt.



Probenhalter für den mechanischen Schleif- und Politurprozess

Die Wärmebehandlung (unter Evakuierung mit Argon-Atmosphäre) der einzelnen Proben, P1, P2 und P3 (mit dem Ziel der Herstellung eines grobkörnigen Gefüges) wurde mit den folgenden Parametern durchgeführt:

Probe	Heizrate	Temp.	Dauer	Temp.	Dauer
P1	300°/h	1375°C	24h		
P2	300°/h	1350°C	24h	1425°C	24h
P3	300°/h	1375°C	24h		

Die daran anschließende erneute Schleif- und Polierprozedur erfolgte ebenfalls schrittweise, zunächst erneut mit 4000er Schleifpapier und daran anschließend mit,

- Diamantsuspension und Lubrikant (3µm)
- Diamantsuspension und Lubrikant (1µm)
- SiO<sub>2</sub>-Lösung mit destilliertem Wasser (0,1µm)

wobei zwischen jedem Einzelschritt eine Reinigung der Probe (inklusive Halter) im Ultraschallbad (mit 50% Ethanol und 50% Isopropanol) erfolgte.

Die abschließende Elektropolitur wurde im Sinne eines optimalen Oberflächenabtrags mit einer speziell an die Probengeometrie angepassten Maske durchgeführt.



Probenhalter für die elektrochemische Behandlung

Als Elektrolyt diente hierbei eine Lösung aus 53ml H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (95%ige Schwefelsäure) mit einem Mol CH<sub>3</sub>OH (Methanol). Die angelegte Spannung betrug 32 Volt, bei einem Strom von 3 A für eine Dauer von etwa 20 Sekunden.

Die folgenden beiden Listen beinhalten die explizit in der Arbeit behandelten Nachbarschaftsverhältnisse in Form der zugrundeliegenden Orientierungsdaten (Eulerwinkel):

Kapitel	Abbildung	Probe	Material	GB	Korn 1			Korn 2		
2.9	Abb. 2-38	P3	Ni	$\Sigma 3$	145,2	30,3	60,0	25,6	25,9	28,7
2.9	Abb. 2-38	P4	PED-Ni	$\Sigma 17b$	127,6	40,9	54,2	317,9	47,2	36,8
4.1	Abb. 4-5	P8	CMSX-4	AB	265,2	25,6	4,2	263,8	9,8	40,8
4.6	Abb. 4-17	P2	Ni	71	203,4	121,8	48,4	165,4	71,9	3,9
5.1.1	Abb. 5-8	P1	Ni	16	263,4	39,1	311,4	85,6	24,7	55,9
5.1.1	Abb. 5-9	P1	Ni	15	263,4	39,1	311,4	353,0	15,3	186,5
5.1.2	Abb. 5-12	P1	Ni	10	126,6	68,4	70,4	263,4	39,1	311,4
5.1.2	Abb. 5-12	P1	Ni	9	111,2	26,6	43,1	126,6	68,4	70,4
5.1.2	Abb. 5-12	P1	Ni	8	111,2	26,6	43,1	263,4	39,1	311,4
5.1.2	Abb. 5-12	P1	Ni	7	111,2	26,6	43,1	149,2	55,5	56,2
5.2.1	Abb. 5-17	P3	Ni	AB	329,6	9,8	38,5	119,2	39,2	33,9
5.2.2	Abb. 5-19	P2	Ni	CD	185,1	98,6	0,7	160,8	56,4	329,1
5.2.3	Abb. 5-22	PW	Ni	EF	145,2	30,3	60,0	25,6	25,9	28,7

Kapitel	Abbildung	Probe	Material	GB	Korn 1			Korn 2		
5.2.4	Abb. 5-28	PW	Ni	65	273,4	18,2	84,4	167,9	40,7	40,6
				12	229,8	34,2	44,9	3,7	17,7	58,3
				64	166,9	40,9	41,4	273,4	18,2	84,4
				40	1,2	18,7	60,8	229,8	34,2	44,9
				66	132,0	35,3	52,1	11,3	22,0	23,2
				108	3,7	40,1	69,2	224,5	35,3	19,7
				63	145,7	12,4	28,5	328,4	35,6	62,3
				68	241,0	24,5	25,1	136,3	38,1	84,7
				102	136,3	38,1	84,7	239,2	24,2	26,7
				107	231,1	37,3	7,1	3,7	40,1	69,2
				70	53,5	22,1	23,8	306,5	37,3	87,1
				69	306,7	38,1	86,9	53,5	22,1	23,8
				10	26,0	44,5	90,0	135,3	44,9	89,0
				9	134,9	45,0	89,3	26,0	44,5	90,0
				11	313,7	38,9	81,1	231,1	37,3	7,1
105	231,1	37,3	7,1	313,1	39,2	81,2				

## Literaturverzeichnis

- Abuz12a** „Quantitative understanding of the role of grain boundaries in polycrystalline deformation via multiscale digital image correlation“ PhD thesis, WAEL Z M ABUZAID, *University of Illinois at Urbana-Champaign* (2012)
- Abuz12b** „Slip Transfer and plastic strain accumulation across grain boundaries in Hastelloy X“ W.Z. ABUZAID, M.D. SANGID, J.D. CARROLL, H. SEHITOGLU, J. LAMBROS, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (2012) 1201-1220
- Bail87** „Dislocation transmission through  $\Sigma=9$  symmetrical tilt boundaries in silicon and germanium“ X. BAILLIN, J. PELISSIER AND J.J. BACMANN, *Philosophical Mag. A*, Vol. 55, No. 2 (1987) 143-164
- Bilb63** „The spread of plastic yield from a notch“ B.A. BILBY, A.H. COTTRELL AND K.H. SWINDEN, *Proc. R. Soc. London A* (1963) 304-314
- Bloc95** „Misorientation measurements near grain boundary cracks after fatigue tests“ C. BLOCHWITZ, J. BRECHBÜHL AND W. TIRSCHLER, *Strength of Materials*, Vol. 27, Nos. 1-2 (1995) 1-12
- Boll81** „Partial secondary dislocations in germanium grain boundaries“ W. BOLLMANN, G. SILVESTRE AND J.J. BACMANN, *Philosophical Magazine A*, Vol. 43, No.1 (1981) 201-212
- Bra04** „Static recovery in titanium alloys at lower temperatures“ M. BRANDES, M.J. MILLS, *Material Science and Engineering A* 387-389 (2004) 570-575
- Clar92** „On the criteria for slip transmission across interfaces in polycrystals“ W.A.T. CLARK, R.H. WAGONER AND Z.Y. SHEN, *Scripta Metallurgica* Vol. 26, (1992) 203-206
- Davi66** „Slip band continuity across grain boundaries in aluminum“ K.G. DAVIS, E. TEGHTSOONIAN, A. LU, *Acta Metallurgica* Vol. 14, Issue 12 (1966) 1677-1684
- Dewa11** „Multiscale modeling of dislocation/grain-boundary interactions: III.  $60^\circ$  dislocation impinging on  $\Sigma_3$ ,  $\Sigma_9$  and  $\Sigma_{11}$  tilt boundaries in Al“ M. DEWALD AND W.A. CURTIN, *Modelling and Simulations in Materials Science and Engineering* 19 055002 (2011) 1-36
- Diff86** „A model of extrusions and intrusions in fatigued metals II. Surface roughening by random irreversible slip“ K. DIFFERT, U. ESSMANN AND H. MUGHRABI, *Philosophical Magazine A*, Vol. 54, No. 2 (1986) 237-258

- Engl10** „Introduction to Texture Analysis“ 2<sup>nd</sup> Edition, O. ENGLER AND V. RANDLE, *CRC Press* (2010)
- Eshe51** „The Equilibrium of Linear Arrays of Dislocations“ J.D. ESHELBY, F.C. FRANK AND F.R.N. NABARRO, *Philosophical Magazine Series 7 Vol. 42 Issue 327* (1951) 351-364
- Essm79** „Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities“ U. ESSMANN AND H. MUGHRABI, *Philosophical Magazine A, Vol. 40, No. 6* (1979) 731-756
- Gott07** „Physikalische Grundlagen der Materialkunde“ 3. Auflage, G. GOTTSTEIN (2007) S. 83ff
- Grah92** „Fabrication of two-dimensional microstructures in Fe-3.25%Si sheet“ M.D. GRAH, K.J. BOWMAN, M. OSTOJA-STARZEWSKI, *Scripta Metallurgica et Materialia* 26 (1992) 429-434
- Grif21** „The Phenomena of Rupture and Flows in Solids“ A.A. GRIFFITH, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, Vol. 221* (1921) 163-198
- Grim84** „The Generating Function for Coincidence Site Lattices in the Cubic System“, HANS GRIMMER, *Acta Cryst. A40* (1984) 108-112
- Guil09** „A study of the cluster effect on fatigue crack initiation“ Y. GUILHELM, G. CAILLETAUD, S. BASSEVILLE, F. CURTIT, J.M. STÉPHAN, *International Conference of Fatigue Ottawa* (2009)
- Hall51** „The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results“ E.O. HALL, *Proc. R. Soc. B64* (1951) 747-753
- Hash99** „Fatigue Crack Nucleation at  $\Sigma 3(112)$  Boundary in a Ferritic Stainless Steel“ S. HASHIMOTO, H. IKEHATA, A. KATO AND H. KATO, *Interface Science* 7 (1999) 159-171
- Henn03** „Elementare Geometrie und Algebra“ H.-W. HENN, Vieweg Verlag, 1. Auflage (2003) 83-84
- Hirt72** „The Influence of Grain Boundaries on Mechanical Properties“ J.P. HIRTH, *Metallurgical Transactions Vol. 3* (1972) 3047-3067
- Hirt82** „Theory of Dislocations“ J.P. HIRTH AND J. LOTHE, Second Edition, *Krieger Publishing Company Malabar, Florida* (1982)
- Jin08** „Interactions between non-screw lattice dislocations and coherent twin boundaries in face-centered cubic metals“ Z.H. JIN, P. GUMBSCH, K. ALBE, E. MA, K. LU, H. GLEITER, H. HAHN, *Acta Materialia* 56 (2008) 1126-1135

- Korb86** „Microscopic versus macroscopic aspect of shear bands deformation” A. KORBEL AND P. MARTIN, *Acta metallurgica*, Vol. 34, No. 10 (1986) 1905-1909
- Künk08** „Modelling of short crack propagation – Transition form stage I to stage II“ B. KÜNKLER, O. DÜBER, P. KÖSTER, U. KRUPP, C.-P. FRITZEN, H.-J. CHRIST, *Engineering Fracture Mechanics* 75 (2008) 715-725
- Lee89** „Prediction of slip transfer mechanisms across grain boundaries“ T.C. LEE, I.M. ROBERTSON AND H.K. BIRNBAUM, *Scripta Metallurgica*, Vol. 23 (1989) pp. 799-803
- Lee90** „TEM in situ deformation study of the interaction of lattice dislocations with grain boundaries in metals“ T.C. LEE, I.M. ROBERTSON, H.K. BIRNBAUM, *Philosophical Magazine A*, Vol. 62, (1990) 131-153
- Lewi04** „Aesthetics versus function: the fall of the Dee bridge, 1847“ P.R. LEWIS AND C. GAGG, *Interdisciplinary Science Reviews* Vol. 29, No. 2 (2004) 177-191
- Li13** „Effect of crystallographic orientation and grain boundary character on fatigue cracking behaviors of coaxial copper bicrystals“ L.L. LI, P. ZHANG, Z.J. ZHANG, Z.F. ZHANG, *Acta Materialia* 61 (2013) 425-438
- Lim85** „Continuity of slip screw and mixed crystal dislocations across bicrystals of nickel at 573 K“ L.C. LIM, R. RAY, *Acta Metallurgica* 33 (1985) 1577
- Livi57** „Multiple slip in bicrystal deformation“ J.D. LIVINGSTON, B. CHALMERS, *Acta Metallurgica* Vol. 5, Issue 6 (1957) 322-327
- Mack58** „Second paper on statistics associated with the random disorientation of cubes” J.K. MACKENZIE, *Biometrika* 45 (1958) 229-240
- More08** „Dislocation interactions mediated by grain boundaries“ P. MORETTI, L. LAURSON, M.J. ALAVA, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* P05010 (2008) 1-13
- Pala07** „Euler’s fixed point theorem: The axis of a rotation“ B. PALAIS AND R. PALAIS, *Journal of Fixed Point Theory and Applications* 2 (2007) 215-220
- Patr13** „Slip transmission in bcc FeCr polycrystal“ L. PATRIARCA, W. ABUZAIID, H. SEHITOGLU, H.J. MAIER, *Materials Science & Engineering A* 588 (2013) 308-317
- Petc53** „The Cleavage Strength of Polycrystals“ N.J. PETCH, *J. Iron Steel Inst.* 174 (1953) 25-28

- Plim95** „Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics“ S. PLIMPTON, *Journal of Computational Physics* 117 (1995) 1-19
- Qu08** „Twin boundaries: Strong or weak?“ S. QU, P. ZHANG, S.D. WU, Q.S. ZANG AND Z.F. ZHANG, *Scripta Materialia* 59 (2008) 1131-1134
- Saka07** „Atomic Structure of Faceted S3 CSL Grain Boundary in Silicon: HRTEM and Ab-initio Calculation“ N. SAKAGUCHI, H. ICHINOSE AND S. WATANABE, *Materials Transactions, Vol. 48, No. 10* (2007) 2585-2589
- Sang10a** „Grain boundary characterization and energetics of superalloys“ M.D. SANGID, H. SEHITOGLU, H.J. MAIER, T. NIENDORF, *Materials Science and Engineering A* 527 (2010) 7115-7125
- Sang11a** „Energy slip transmission and nucleation at grain boundaries“ M.D. SANGID, T. EZAZ, H. SEHITOGLU, I.M. ROBERTSON, *Acta Materialia* 59 (2011) 283-296
- Sang11b** „An energy-base microstructure model to account for fatigue scatter in polycrystals“ M.D. SANGID, H.J. MAIER, H. SEHITOGLU, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 59 (2011) 595-609
- Sang11c** „A physically based fatigue model for prediction of crack initiation from persistent slip bands in polycrystals“ M.D. SANGID, H.J. MAIER, H. SEHITOGLU, *Acta Materialia* 59 (2011) 328-341
- Sarm08** „Microstructure and mechanical properties of ultra fine grained Cu-Zn and Cu-Al alloys produced by cryorolling and annealing“ V.S. SARMA, K. SIVAPRASAD, D. STURM, M. HEILMAIER, *Materials Science and Engineering A* 489 (2008) 253-258
- Schä10** „Über die Wechselwirkung kurzer Ermüdungsrisse mit Korngrenzen – Systematische Experimente mit Focussed Ion Beam Microscope und mikrostruktureller Tomographie“ Dissertation WOLFGANG SCHÄF, *Saarbrücken* (2010)
- Scho10** „The stress field of an array of parallel dislocation pile-ups: Implications for grain boundary hardening and excess dislocations distributions“ R. SCHOUWENAARS, M. SEEFELDT, P. VAN HOUTTE, *Acta Materialia* 58 (2010) 4344-4353
- Schm50** „Plasticity of Crystals with Special Reference to Metals“ E. SCHMID UND W. BOAS, *F.A. Hughes & Co. Limited London* (1950)
- Schu03** „Analysis of grain boundary networks and their evolution during grain boundary engineering“ C.A. SCHUH, M. KUMAR, W.E. KING, *Acta Materialia* 51 (2003) 687-700
- Schu90** „Metallographie“ H.SCHUMANN, 13. Auflage, *Verlag für Grundstoffindustrie Stuttgart* (1990)

- Sieg05** „Generalized stacking fault energies, ductilities, and twinnabilities of Ni and selected Ni alloys“ D.J. SIEGEL, *Applied Physics Letters* 87, 121901 (2005)
- Shen88** „Dislocation and grain boundary interactions in metals“ Z. SHEN, R.H. WAGONER AND W.A.T. CLARK, *Acta Metalurgica*, Vol. 36, No. 12 (1988) 3231-3242
- Shi09** „Grain-boundary interactions and orientation effects on crack behavior in polycrystalline aggregates“ J. SHI, M.A. ZIKRY, *International Journal of Solids and Structures* 46 (2009) 3914-3925
- Tuck69** „Plane boundaries and straight dislocations in elastically anisotropic materials“ M.O. TUCKER, *Philosophical Magazine*, Vol. 19, Issue 163 (1969) 1141-1159
- Sutt95** „Interfaces in Crystalline Materials“ A.P. SUTTON AND R.W. BALLUFFI, *Clarendon Press Oxford* (1995) S.738ff
- Veho04** „Fatigue crack nucleation at interfaces“ H. VEHOFF, A. NYKYFORCHYN, R. METZ, *Materials Science and Engineering A* 387-389 (2004) 546-551
- Walt90** „Interkristalline Spannungsrißkorosion und Korrosionsermüdung an FeSi 2,8% Ein-, Bi- und Polykristallen“ Dissertation J. Waltersdorf, *Düsseldorf* (1990) 36-38
- Wels11** „Bildung von Mikrorissen an Korngrenzen – Einfluss der Orientierung auf lokale Oberflächenspannungen und auf die Ermüdungsrissebildung“ Dissertation M.T. WELSCH, *Saarbrücken* (2011) S. 96
- Wern90** „Slip Transfer Across Grain And Phase Boundaries“ E. WERNER AND W. PRANTL, *Acta Metalurgica et Materialia* Vol 38, No. 3, (1990) 533-537
- Zhan00a** „Comparison of fatigue cracking possibility along large- and low-angle grain boundaries“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG, *Materials Science and Engineering*, A284 (2000) 285-291
- Zhan00b** „Relationship between the fatigue cracking probability and the grain-boundary category“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG, *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 80, No. 7 (2000) 483-488
- Zhan03** „What types of grain boundaries can be passed through by persistent slip bands?“ Z.F. ZHANG, Z.G. WANG AND J. ECKERT, *J. Mater. Res.*, Vol. 18, No. 5 (2003) 1031-1034
- Zhan11** „Low-cycle fatigue-cracking mechanisms in fcc crystalline materials“ P. ZHANG, S. QU, Q.Q. DUAN, S.D. WU, S.X. LI, Z.G. WANG AND Z.F. ZHANG, *Philosophical Magazine* Vol. 91, No. 2 (2011) 229-249

## Lebenslauf:

### Alain Franz Knorr

wohnhaft: Zäselerstraße 31 in 66606 St. Wendel – Bliesen

geboren am 30. April 1985 in St. Wendel

Religion: römisch-katholisch

Nationalität: deutsch und französisch

verheiratet mit Janine Marie Knorr; ein Sohn, Henri Lucien Knorr

---

2004	Abitur am Cusanus Gymnasium in St. Wendel
2004 bis 2005	Wehrdienst
WS04/05	Früheinstieg ins Mathematik-/Physikstudium, TU Kaiserslautern
SS05 bis SS09	<b>Studium der Physik</b> , TH Karlsruhe (Abschluß Diplom-Physiker)
seit WS09/10	Promotionsstudium der Materialwissenschaften, Universität des Saarlandes
Nov. 2009	<b>Wissenschaftlicher Mitarbeiter</b>
bis Dez. 2013	am Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaft und Methodik (Prof. Vehoff) bzw. Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften (Prof. Motz)

## Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich benannten Quellen und Hilfsmittel benutzt. Wörtlich oder sinngemäß übernommenes Gedankengut habe ich als solches kenntlich gemacht.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

