

## Symbolische Darstellung der Stapelfehler in dichtesten Kugelpackungen

VON ERWIN M. HÖRL

Österreichische Studiengesellschaft für Atomenergie, Institut Metallurgie, Reaktorzentrum Seibersdorf, Österreich

(Eingegangen am 5. August 1969 und wiedereingereicht am 11. Dezember 1969)

A general symbolic representation of the stacking faults in close-packed structures is given. It is based on  $n$ -layer symbols assigned to points in a three-dimensional space. Graphical symbols are introduced in order to represent undisturbed structures as well as stacking faults on a general basis.

### 1. Einleitung

Die dichtesten Kugelpackungen sind schon seit längerer Zeit Gegenstand der Untersuchung, was die Art und die Anordnung ihrer Stapelfehler betrifft. Vor allem haben sich die theoretischen wie auch experimentellen Bemühungen auf die kubisch-flächenzentrierte Struktur und die hexagonal-dichteste Kugelpackung konzentriert, da ja den in der Natur vorkommenden Vertretern dieser Strukturen in der praktischen Metallurgie eine grosse Bedeutung zukommt.

In der vorliegenden Arbeit wird eine  $n$ -Schichten-Symbolik für die Darstellung der Stapelfehler der Kristallstrukturen mit einer dichtesten Packung gleich grosser Atome aufgebaut. Diese Symbolik kann auch immer dann angewendet werden, wenn es drei mögliche Positionen von Atomlagen bzw. Schichten gibt, wie es z.B. bei Graphit und Molybdänit der Fall ist.

Aufbauend auf dem Spezialfall der 4-Schichten-Symbolik wurde ferner eine graphische Symbolik entwickelt, die es gestattet, Idealstrukturen wie auch Stapelfehler durch einfache graphische Zeichen darzustellen. Dabei sind die Zeichen, die für die Stapelfehler einer bestimmten Idealstruktur Verwendung finden dieselben, wie die, die die anderen Idealstrukturen wiedergeben. Dadurch kommt schon in den Symbolen klar zum Ausdruck, dass ein Stapelfehler immer als ein in einem örtlich begrenzten Kristallbereich stattfindender Übergang in eine andere Idealstruktur gedeutet werden kann.

### 2. Symbolische Darstellung der Struktur dichtester Kugelpackungen

Kristallstrukturen, die räumlich-dichteste Packungen von Kugeln gleicher Grösse darstellen, lassen sich durch dichtest gepackte Lagen von Kugeln aufbauen. Die auf eine dichtest gepackte Lage folgende Lage kann im Bezug auf die erstere, die wir in Position  $A$  annehmen wollen, die Positionen  $B$  oder  $C$  einnehmen. Daraus folgt, dass jede beliebige Sequenz der Buchstaben  $A$ ,  $B$  und  $C$ , etwa ...  $ABACBACAB$  ..., eine dichteste Kugelpackung darstellt. Für einen stapelfehlerfreien, idealen Kristall ist es noch zusätzlich notwendig, dass eine Periodizität von Buchstabengruppen

gegeben ist, durch die der Zellaufbau des Kristalls zum Ausdruck kommt.

Die  $ABC$ -Symbolik hat den Nachteil, dass sie für die Darstellung der Struktur eines idealen Kristalls, wie auch für die Darstellung von Stapelfehlern immer mehrere Buchstabenfolgen liefert, die ein und dieselbe Atomanordnung wiedergeben. Einen Fortschritt in dieser Hinsicht hat die Einführung der Frankschen Nabla-Delta-Symbolik (Read, 1953) gebracht. Da die Aufeinanderfolge ...  $AB$  ..., ...  $BC$  ... und ...  $CA$  ... ein und dieselbe relative Verschiebung zweier benachbarter Lagen darstellt, kann für sie ein einziges Symbol, nämlich  $\nabla$ , verwendet werden. Analog ist es möglich für die Aufeinanderfolge ...  $BA$  ..., ...  $CB$  ... und ...  $AC$  ... ein Symbol,  $\Delta$ , zu verwenden.

Die  $\nabla\Delta$ -Symbolik hat noch immer den Nachteil, dass immer zwei Sequenzen für ein und dieselbe reale Atomanordnung möglich sind, so z.B.  $\Delta\nabla\Delta\nabla$  und  $\nabla\Delta\nabla\nabla$  für einen hexagonalen Kristall von 6 Lagen. Ferner ergibt sich eine oft recht unübersichtliche Darstellung der Fehler einer Stapelfolge, die kein einheitliches System der Klassifikation zulässt.

Abhilfe schafft bereits eine von Jagodzinski (1949) entwickelte Symbolik, die als Zeichen die Buchstaben  $h$  und  $k$  verwendet. Aus Gründen der Einheitlichkeit werden wir an Stelle von  $h$  ein Quadrat und an Stelle von  $k$  einen Kreis schreiben.

Die Einführung der Zeichen  $\circ$  und  $\square$  erfolgt nun dadurch, dass wir die Aufeinanderfolge ...  $\nabla\nabla$  ... bzw. ...  $\Delta\Delta$  ... durch das Zeichen  $\circ$ , die Aufeinanderfolge ...  $\nabla\Delta$  ... bzw. ...  $\Delta\nabla$  ... durch das Zeichen  $\square$  symbolisieren. Die kubisch-flächenzentrierte Struktur wird somit durch die Zeichensequenz

...  $\circ\circ\circ\circ\circ\circ$  ...,

die hexagonal-dichteste Kugelpackung durch die Folge

...  $\square\square\square\square$  ...

dargestellt. Die Sequenzen

...  $\square\circ\square\circ\square\circ$  ...

und

...  $\square\square\circ\square\square\circ\square\square\circ$  ...

liefern den hexagonalen Mischtyp ( $\alpha$ -Lanthan-Typ) und den  $\alpha$ -Samarium-Typ.

### 3. Darstellung der Stapelfehler mit Hilfe der $\circ\square$ -Symbolik

Mit der  $\circ\square$ -Symbolik ist es sehr einfach, alle theoretisch möglichen Stapelfehler der kubisch-flächenzentrierten Struktur und der hexagonal-dichtesten Kugelpackung darzustellen (Nabarro, 1967).

Ersetzen wir beispielsweise in der Sequenz der Kreise  $\dots\circ\circ\circ\circ\dots$  der idealen kubisch-flächenzentrierten Struktur einen Kreis durch das 'Gegenzeichen', das Quadrat, so erhalten wir den einfachsten Stapelfehler, der in dieser Struktur möglich ist:

$$\dots\circ\circ\circ\square\circ\circ\circ\dots \quad (1)$$

Dieser Fehler ist als Zwillingsfehler bekannt.

Ersetzen wir nicht nur einen Kreis durch ein Quadrat, sondern zwei Kreise durch Quadrate, so erhalten wir eine theoretisch unendlich grosse Anzahl von Fehlern, da wir zwei benachbarte Kreise, zwei durch einen Kreis getrennte Kreise usw. jeweils durch Quadrate ersetzen können. Die Folge

$$\dots\circ\circ\circ\square\square\circ\circ\circ\dots \quad (2)$$

ergibt den als intrinsischen Fehler bekannten Stapelfehler, die Sequenz

$$\dots\circ\circ\circ\square\square\circ\circ\circ\dots \quad (3)$$

liefert den extrinsischen Fehler. Ersetzen wir zwei durch zwei Kreise getrennte Kreise durch Quadrate, so erhalten wir die Zeichenfolge

$$\dots\circ\circ\circ\square\circ\circ\square\circ\circ\circ\dots \quad (4)$$

Dieser Fehler stellt bereits zwei direkt aufeinanderfolgende Zwillingsfehler dar. Alle weiteren Folgen enthalten zwei Zwillingsfehler in mehr oder minder grossem Abstand.

Die weiteren Fehler der kubisch-flächenzentrierten Struktur erhalten wir indem wir drei Kreise durch Quadrate, vier Kreise durch Quadrate usw. ersetzen.

In analoger Weise lassen sich auch für die hexagonal-dichteste Kugelpackung die Stapelfehler durch den

Austausch von Quadraten durch Kreise darstellen. Es ergeben sich dann die folgenden Zeichensequenzen:

$$\dots\square\square\square\circ\square\square\square\dots \quad (5)$$

$$\dots\square\square\square\circ\circ\square\square\square\dots \quad (6)$$

$$\dots\square\square\square\circ\circ\circ\square\square\square\dots \quad (7)$$

usw.

Stapelfehler in einer beliebigen Art einer dichtesten Kugelpackung zeigen sich in Störungen der idealen Zeichensequenz. Für den hexagonalen Mischtyp erhalten wir beispielsweise für die Stapelfehler die Zeichenfolgen

$$\dots\square\circ\square\square\square\circ\square\circ\square\circ\dots \quad (8)$$

$$\dots\square\circ\square\circ\square\circ\circ\square\circ\square\circ\dots \quad (9)$$

und

$$\dots\square\circ\square\circ\square\square\circ\circ\square\circ\circ\square\dots \quad (10)$$

$$\dots\square\circ\square\circ\square\circ\circ\circ\square\circ\circ\circ\dots \quad (11)$$

$$\dots\square\circ\square\circ\square\square\square\circ\square\circ\square\circ\dots \quad (12)$$

$$\dots\square\circ\square\circ\square\circ\circ\circ\square\circ\square\circ\dots \quad (13)$$

$$\dots\square\circ\square\circ\square\circ\square\circ\square\circ\square\circ\dots \quad (14)$$

$$\dots\circ\square\circ\square\circ\circ\square\circ\circ\square\circ\circ\dots \quad (15)$$

u. s. w.

Die letzten beiden Sequenzen stellen bereits direkte Aufeinanderfolgen von Fehlern (8) bzw. (9) dar.

### 4. $n$ -Schichten-Symbolik

Während durch die Buchstaben  $A, B$  und  $C$  die Lage jeder einzelnen Netzebene fixiert wird, bringen die Zeichen  $\nabla$  und  $\Delta$  die relative Lage von je zwei aufeinanderfolgenden Ebenen zum Ausdruck. Wir könnten daher die Buchstaben  $A, B$  und  $C$  als Symbole einer 1-Schicht-Symbolik, die Zeichen  $\nabla$  und  $\Delta$  als Symbole einer 2-Schichten-Symbolik auffassen. Die Zeichen  $\circ$

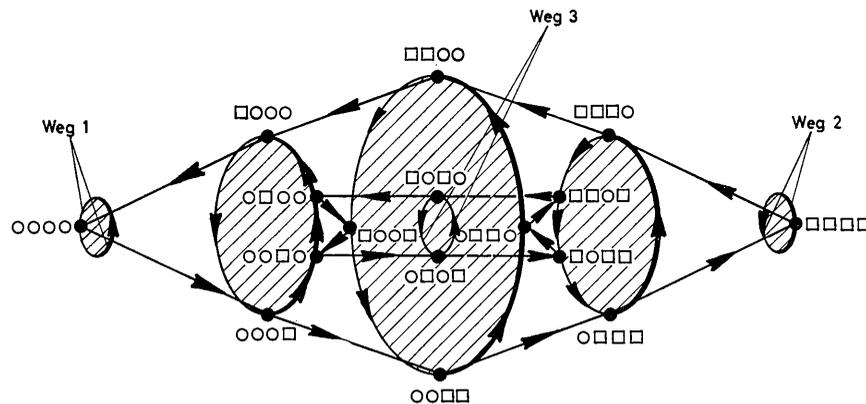


Fig. 1. Wegdiagramm für die 6-Schichten-Symbole. Die schraffierten Ellipsen sind Kreise in parallelen und äquidistanten Ebenen. Die einzelnen Symbolpunkte sind durch die ihnen zugeordneten Symbole gekennzeichnet. Der Weg 1 entspricht der kubisch-flächenzentrierten Struktur, der Weg 2 der hexagonal-dichtesten Kugelpackung, der Weg 3 dem hexagonalen Mischtyp.



fehler in der kubisch-flächenzentrierten Struktur und hexagonal-dichtesten Kugelpackung erreicht. Die Darstellung der Stapelfehler war in beiden Strukturen jeweils durch den Ersatz von Zeichen der Idealsequenz durch ihre Gegenzeichen möglich. Damit war eine symmetrische Zuordnung der Fehler gegeben. So entsprach z.B. der Fehler

$$\dots \circ \circ \circ \square \circ \square \circ \circ \dots \quad (3)$$

der kubisch-flächenzentrierten Struktur dem Fehler

$$\dots \square \square \circ \square \circ \square \square \dots \quad (7)$$

der hexagonal-dichtesten Kugelpackung.

Will man diese symmetrische Zuordnung nicht nur auf die kubisch-flächenzentrierte Struktur und die hexagonal-dichteste Kugelpackung beschränken, sondern auch auf den hexagonalen Mischtyp ausdehnen, was bei Arbeiten mit Kristallen dieses Strukturtyps besonders vorteilhaft ist, so ist dies erst mit Einführung der 4-Schichten-Symbolik möglich.

In der 4-Schichten-Symbolik gibt es 4 Symbole, die ausgedrückt durch die Zeichen der 3-Schichten-Symbolik, lauten:  $\circ \circ$   $\circ \square$   $\square \circ$   $\circ \circ$ . Wir können sie nach Abschnitt 4 in drei Gruppen teilen. Dabei enthält die erste Gruppe das Zeichen  $\circ \circ$ , die zweite die beiden Zeichen  $\circ \square$  und  $\square \circ$  und schliesslich die dritte Gruppe das Zeichen  $\square \square$ . Das Wegdiagramm für diese Zeichen ist in Fig. 2 dargestellt.

Es hat sich nun als sehr günstig erwiesen, auf diesem Wegdiagramm eine graphische Symbolik aufzubauen. Ungestörte Strukturen werden nun einfach durch die ihnen entsprechenden geschlossenen Wegzüge dargestellt. Die erste Reihe der Fig. 3 zeigt beispielsweise die graphischen Zeichen für die kubisch-flächenzentrierte Struktur, den hexagonalen Mischtyp und für die hexagonal-dichteste Kugelpackung. Wir sehen, dass es in allen drei Fällen Kreise sind; jedoch liegen ihre Mittelpunkte an verschiedenen Punkten.

Die Darstellung eines Stapelfehlers erfolgt durch die Wegkurve, die ihn charakterisiert (siehe § 4). So ergibt sich z.B. für den einfachsten Stapelfehler der kubisch-flächenzentrierten Struktur, den Zwillingfehler, der Kurvenverlauf (1) der Fig. 3 für den einfachsten Stapelfehler der hexagonal-dichtesten Kugelpackung der Kurvenzug (5). Wir sehen wieder klar die symmetrische Darstellung, die sich jetzt in einer tatsächlichen Spiegelsymmetrie der graphischen Symbole äussert. Der hexagonale Mischtyp ist jetzt in die einheitliche Darstellung der Stapelfehler mit einbezogen. Die einfachsten zwei Fehler dieser Struktur [Kurvenzug (8) und (9)] haben Symbole, die den Symbolen (1) und (5) bis auf eine Verschiebung gleichen.

Betrachten wir das graphische Symbol für die ungestörte  $\alpha$ -Sm-Struktur,  $\bullet \overline{\circ \circ} \bullet$ , und das dazu spiegelsymmetrische Zeichen  $\overline{\bullet \bullet} \bullet$ , das eine Struktur mit dem Zellaufbau  $ABCACB$  repräsentiert, so sehen wir sofort, dass die gerade beschriebenen Stapelfehler

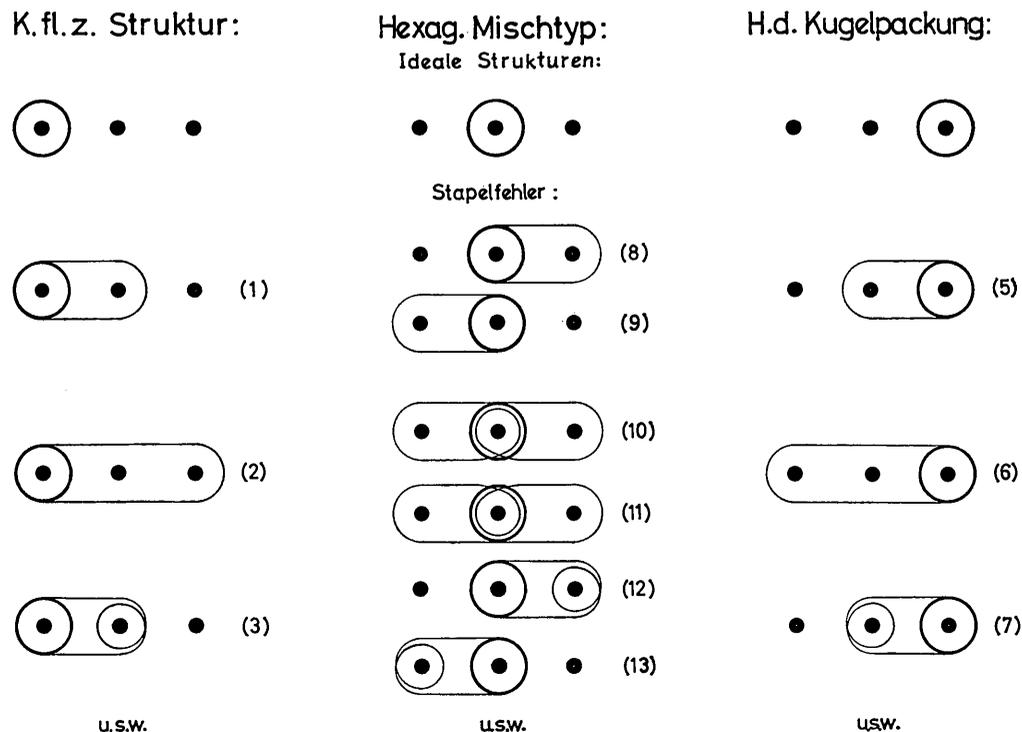


Fig. 3. Graphische 4-Schichten-Symbole. Die in Klammer gesetzten Zahlen beziehen sich auf die in § 3 mit Hilfe der 3-Schichten-Symbolik dargestellten Fehler.

nichts anderes darstellen als örtlich begrenzte Kristallbereiche mit der  $\alpha$ -Sm-bzw. der *ABCACB*-Struktur.

Auch bei den Fehlern höherer Ordnung [Fig. 3, Kurvenzug (2) usw.] ist die Symmetrie der Darstellung klar erkennbar. Ferner stellen natürlich auch hier wieder die Kurvenzüge der Stapelfehler Kurvenzüge von Idealstrukturen dar.

### 6. Simulation von Kristallen mit Stapelfehlern durch Analog-Stromkreise

Die entwickelte Symbolik ist geeignet, Kristalle mit Stapelfehlern durch elektrische Stromkreise zu simulieren. Betrachten wir einen realen Kristall mit Stapelfehlern, so durchläuft z.B. im Wegdiagramm der Fig. 2 ein Aufpunkt einen bestimmten Weg, wenn wir von der ersten zur letzten Netzebene vorwärtsschreiten. Dieser Weg ist durch die Art der Struktur und die Häufigkeit der einzelnen Stapelfehlertypen charakterisiert.

Denken wir uns nun dieses Wegdiagramm als elektrisches Leitungsdiagramm und den Aufpunkt als elektrischen Impuls, so können wir, wenn wir an den 'Weichen' statistische 'Gates' anbringen, den Aufbau des Kristalls simulieren. Weichen existieren im Wegdiagramm der Fig. 2 in den untersten Punkten des linken und mittleren Kreises, wie auch in den obersten Punkten des mittleren und rechten Kreises. Die statistischen Gates sind so eingestellt, dass mit einer

bestimmten Wahrscheinlichkeit  $w_i$  ( $i=1, 2, 3$  u.  $4$ ) der gerade Weg und mit der Wahrscheinlichkeit  $1-w_i$  der krumme Weg eingeschlagen wird.

Für die tatsächliche Realisierung eines solchen Stromkreises ist es erstens notwendig, an bestimmten Stellen des Kreises für eine Abnahme eines Signals für die Steuerung eines Computerprogramms Vorsorge zu tragen. Zweitens sind Verzögerungsleitungen einzubauen, damit die abgenommenen Signale getrennt registriert werden können. Ferner ist dann drittens noch an der am meisten durchlaufenen Stelle des Kreises für eine Verstärkung bzw. Wiedererzeugung des Impulses zu sorgen.

Mit einem solchen Analog-Stromkreis ist es z.B. möglich, die Streuung von Röntgenstrahlen an einem beliebigen Kristall mit statistisch verteilten Stapelfehlern zu behandeln und die Intensitätsverteilung im  $k$ -Raum zu berechnen. Falls durch weitere Gate-Kreise für eine statistische Änderung der Größen  $w_i$  gesorgt wird, können die Effekte einer nicht statistischen Anordnung von Stapelfehlern studiert werden.

### Literatur

- JAGODZINSKI, H. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 201.  
 NABARRO, F. R. N. (1967). *Theory of Crystal Dislocations*, p. 202. Oxford: Clarendon Press.  
 READ, W. T. (1953). *Dislocations in Crystals*, p. 94. New York: McGraw-Hill.

*Acta Cryst.* (1971).A27, 206

## The Polytypic Growth in Zinc Sulphide Crystals

BY KAILASH NATH RAI

*Department of Physics, Banaras Hindu University, Varanasi-5, India*

(Received 21 November 1969 and in revised form 3 June 1970)

Various mechanisms for the polytypic growth in zinc sulphide crystals have been discussed. It has been pointed out that the polytypic growth in this compound is a result of the ordering of f.c.c. microtwins along the  $\langle 111 \rangle$  directions. A comparison between the structures actually found and those expected from consideration of the periodically repeated f.c.c. type microtwins shows a good agreement. The periodic occurrence of f.c.c. type microtwins has been shown to result from  $2H$  structures containing growth faults only, when faults due to slip at alternate layers and axial screw dislocations operate simultaneously. This mechanism is assumed to operate only at a stage when crystals are growing, and it can successfully predict almost all structures which are actually found in ZnS polytypes. Only a few polytypes (three,  $9R$ ,  $12R$ , and  $21R$ , out of more than a hundred) with structures not fitting the above mechanism have been attributed to the insertion of periodic stacking faults in some other polytypes (which are generated in accordance with the proposed mechanism) at a later stage of the crystal growth.

### Introduction

Polytypic growth is a phenomenon, characterized by the periodic repetition of stacking faults in close-packed planes of solids, leading to a series of new structures which are identical in the **a** and **b** directions

and differ only in the **c** direction (perpendicular to the stacking of layers) of the unit cell. Each member of such a structure series is known as a polytype. Like SiC, PbI<sub>2</sub>, CdI<sub>2</sub> and many other compounds, ZnS exhibits polytypic growth. The growth process of polytypes has been a subject of discussion for many