

# 1 Hinter Gittern

## In diesem Kapitel ...

- erfahren Sie all das, was es hinter Gittern von metallischen Werkstoffen zu verstehen gibt
- lernen Sie die verschiedenen Gittertypen und Gitterfehler kennen
- werden Sie sehen, wie hierüber entscheidender Einfluss auf die Werkstoffeigenschaften ausgeübt werden kann

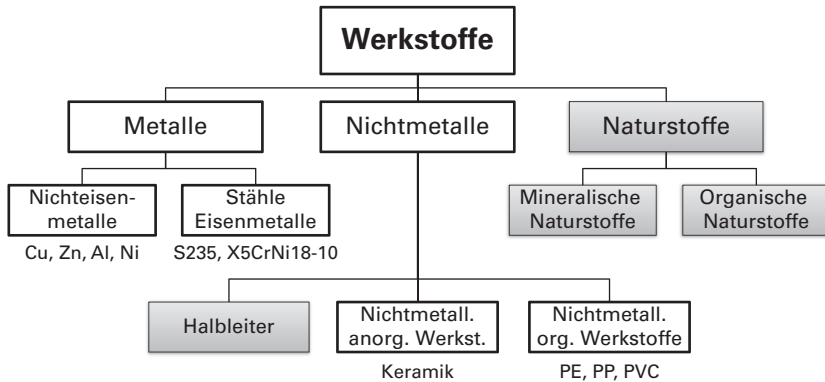
In diesem Kapitel werden wird alles Wichtige angesprochen, was hinter Gittern metallischer Werkstoffe steht. Dazu zählen zunächst einmal elementare Kenntnisse, wie die Einteilung der Werkstoffe und der Atomaufbau, sowie die Atomarten, aus denen sich dann die verschiedenen Bindungstypen ableiten lassen. Erst dann können wir uns mit den wichtigsten Gittertypen und Gitterfehlern beschäftigen, die uns durch das ganze Buch begleiten werden, weil sie bereits eine Vielzahl der Werkstoffeigenschaften entscheidend beeinflussen.

## Einteilung der Werkstoffe

Bevor wir uns den Gittertypen und Gitterfehlern widmen können, müssen wir uns zunächst mit einigen Grundlagen der Werkstoffkunde und Werkstoffchemie beschäftigen. Lassen Sie uns mit einer Einteilung der Welt der Werkstoffe beginnen (siehe Abbildung 1.1).

Werkstoffe werden grob in die drei Bereiche „*Metalle*“, „*Nichtmetalle*“ und „*Naturstoffe*“ eingeteilt. Innerhalb der Naturstoffe differenziert man zwischen mineralischen und organischen Naturstoffen. Dies umschließt auch Werkstoffe wie Holz aber auch Beton, die allerdings **nicht** Gegenstand dieses Schnellkurses sind.

Die Nichtmetalle lassen sich in Halbleiter, nichtmetallische anorganische Werkstoffe und nichtmetallische organische Werkstoffe einteilen. Halbleiter, die insbesondere für Ingenieure der Elektrotechnik relevant sind, werden wir in diesem Kurs auch nicht näher betrachten. Zu den nichtmetallischen anorganischen Werkstoffen zählen die Keramiken und zu den nichtmetallischen



**Abbildung 1.1** Einteilung der Werkstoffe

organischen Werkstoffen die Kunststoffe, wie beispielsweise Polyethylen, Polypropylen oder Polyvinylchlorid. Auf diese beiden Werkstoffklassen wird in Kapitel 10 näher eingegangen.

Innerhalb der metallischen Werkstoffe liegt der Schwerpunkt auf den Stählen und Eisenwerkstoffen. Alle anderen Metalle werden zusammengefasst unter dem Begriff „Nichteisenmetalle“. Hierunter fallen beispielsweise Kupfer, Zink, Aluminium und Nickel. Diese interessanten Werkstoffe werden wir in Kapitel 9 betrachten.

Den Schwerpunkt der ersten sechs Kapitel bilden die Stähle und Eisenmetalle. So werden Ihnen nach dem Durcharbeiten der beiden ersten Kapitel auch Bezeichnungen wie S235 oder X5CrNi18-10 etwas sagen.

## Atomaufbau

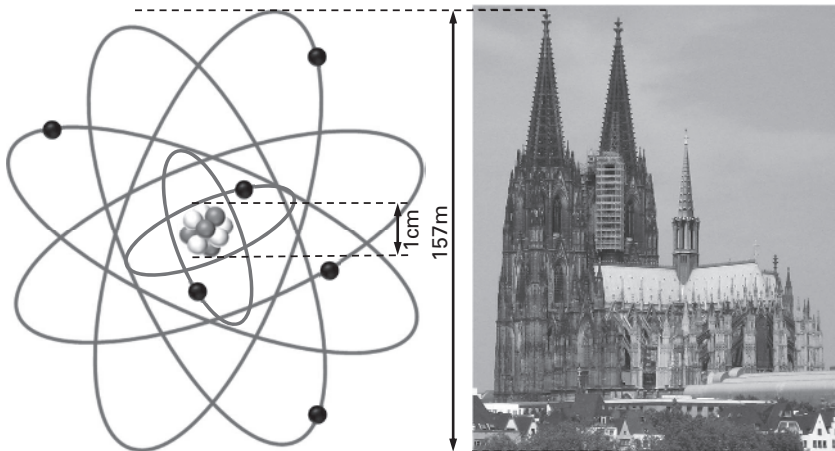
Damit wir die Struktur und die daraus resultierenden Eigenschaften der verschiedenen Werkstoffklassen verstehen können, müssen wir zunächst die verschiedenen Bindungsarten kennenlernen. Die Tatsache, dass es überhaupt verschiedene Bindungsarten gibt, resultiert aus dem Aufbau der Atome.

Wie die meisten von Ihnen sicherlich wissen, bestehen Atome aus verschiedenen Elementarteilchen:

- Elektronen, die eine negative elektrische Ladung tragen,
- Protonen, die eine positive elektrische Ladung tragen und
- Neutronen, die neutral sind.

In jedem Atom sind gleich viele Elektronen wie Protonen vorhanden, so dass es zu einem Ladungsausgleich kommt.

Abbildung 1.2 zeigt links ein Kohlenstoffatom nach dem Bohr'schen Atommodell, bei dem sich die Elektronen auf bestimmten Kreisbahnen um den Atomkern bewegen. Um den Kern, bestehend aus 6 Protonen und 6 Neutronen, kreisen 6 Elektronen: zwei auf der innersten Schale und 4 auf der äußeren. Hierbei entsprechen die Proportionen aber nicht der Realität. Bei allen bekannten Atomen beträgt der Radius des Atomkerns nur  $1/10.000$  bis  $1/100.000$  des Atomradius. Wäre der Atomkern  $1\text{cm}$  groß (in etwa die Größe eines Kirschkerns), dann würde der Radius des gesamten Atoms der Höhe des Kölner Domes entsprechen, dem dritthöchsten Kirchengebäude der Welt.



**Abbildung 1.2** Atomaufbau und das Größenverhältnis Atomkern/Atom

Alle Atome, die im neutralen Zustand gleichviele Elektronen besitzen, gehören zu einem chemischen Element. Nun gibt es aber über 100 verschiedene Elemente, das heißt Elemente mit mehr oder weniger Elektronen und Protonen. Die einzelnen Elektronen eines Atoms können sich zum einen in der Entfernung zum Kern und zum anderen auch in ihrem Energiezustand unterscheiden (siehe Abbildung 1.3). Die Elektronen befinden sich in bestimmten Energiestufen, die nach Nils Bohr auch „Schalen“ genannt werden.

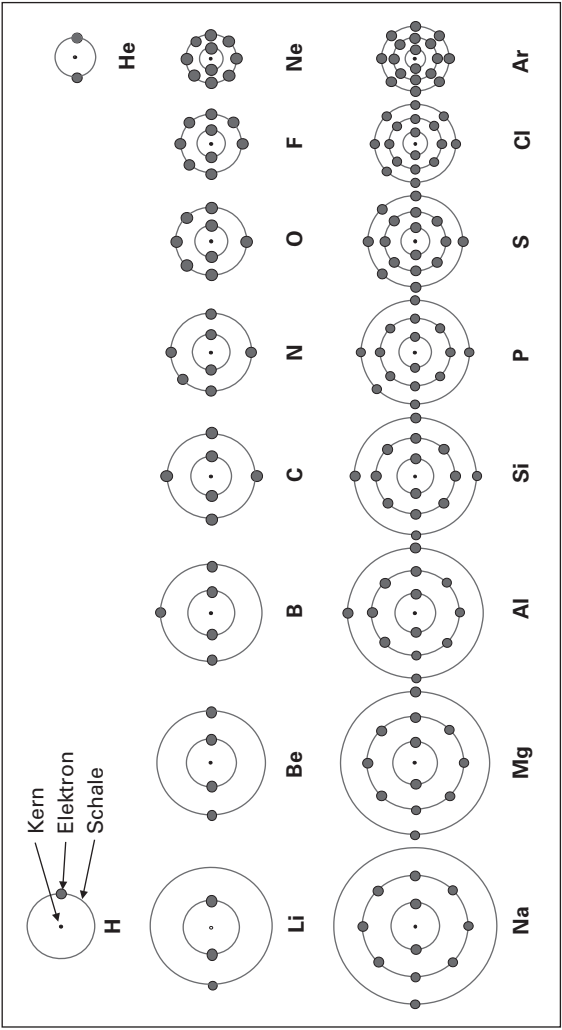


Abbildung 1.3 Elemente 1 bis 19 nach dem Atommodell von Nils Bohr

**Erinnerung**

Die Elektronen der äußersten Energiestufe heißen Außenelektronen, sie spielen für die Chemie und damit auch für die Bindungsarten die entscheidende Rolle!

Die Elektronenanordnung lässt sich aus dem Periodensystem der Elemente ablesen (siehe Abbildung 1.4): Die Hauptgruppenzahl entspricht der Anzahl der Außenelektronen, die Periode entspricht der Anzahl an Schalen.

|           | Hauptgruppen               |                            |                            |                            |                            |                            |                           |
|-----------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|---------------------------|
|           | I                          | II                         | III                        | IV                         | V                          | VI                         | VII                       |
| Periode 1 | <sup>1</sup> H<br>1,01     |                            |                            |                            |                            |                            |                           |
| Periode 2 | <sup>3</sup> Li<br>6,94    | <sup>4</sup> Be<br>9,01    | <sup>5</sup> B<br>10,81    | <sup>6</sup> C<br>12,01    | <sup>7</sup> N<br>14,01    | <sup>8</sup> O<br>16,00    | <sup>9</sup> F<br>19,00   |
| Periode 3 | <sup>11</sup> Na<br>22,99  | <sup>12</sup> Mg<br>24,31  | <sup>13</sup> Al<br>26,98  | <sup>14</sup> Si<br>28,08  | <sup>15</sup> P<br>30,97   | <sup>16</sup> S<br>32,08   | <sup>17</sup> Cl<br>35,45 |
| Periode 4 | <sup>19</sup> K<br>39,10   | <sup>20</sup> Ca<br>40,08  | <sup>31</sup> Ga<br>69,72  | <sup>32</sup> Ge<br>72,79  | <sup>33</sup> As<br>74,92  | <sup>34</sup> Se<br>78,96  | <sup>35</sup> Br<br>79,90 |
| Periode 5 | <sup>37</sup> Rb<br>85,47  | <sup>38</sup> Sr<br>87,62  | <sup>49</sup> In<br>114,82 | <sup>50</sup> Sn<br>118,69 | <sup>51</sup> Sb<br>121,75 | <sup>52</sup> Te<br>127,60 | <sup>53</sup> I<br>126,90 |
| Periode 6 | <sup>55</sup> Cs<br>132,91 | <sup>56</sup> Ba<br>226,03 | <sup>81</sup> Tl<br>204,38 | <sup>82</sup> Pb<br>207,20 | <sup>83</sup> Bi<br>208,98 | <sup>84</sup> Po<br>210    | <sup>85</sup> At<br>210   |
| Periode 7 | <sup>87</sup> Fr<br>223    | <sup>88</sup> Ra<br>226,01 |                            |                            |                            |                            |                           |

**Abbildung 1.4** Ausschnitt aus dem Periodensystem der Elemente (ohne Edelgase)

## Oktettregel

Die Edelgase, die im Periodensystem in Abbildung 1.5 weiß markiert sind, sind reaktionsträge, also chemisch stabil, weil sie keinen Bedarf an zusätzlichen Elektronen haben. Sie haben eine volle äußere Schale.

In der jeweils äußersten Schale finden zunächst acht Elektronen Platz. Eine Ausnahme bildet hier Helium, da auf der ersten und kleinsten Schale nur maximal zwei Elektronen Platz finden.

| Hauptgruppen |    |    | Nebengruppen |     |    |     |      |       |    |     |    |    | Hauptgruppen |    |    |    |     |      |  |
|--------------|----|----|--------------|-----|----|-----|------|-------|----|-----|----|----|--------------|----|----|----|-----|------|--|
|              | I  | II |              |     |    |     |      |       |    |     |    |    | III          | IV | V  | VI | VII | VIII |  |
| 1            | H  |    |              |     |    |     |      |       |    |     |    |    |              |    |    |    |     | He   |  |
| 2            | Li | Be |              |     |    |     |      |       |    |     |    |    | B            | C  | N  | O  | F   | Ne   |  |
| 3            | Na | Mg | IIIa         | IVa | Va | VIa | VIIa | VIIIa | Ia | IIa |    | Al | Si           | P  | S  | Cl | Ar  |      |  |
| 4            | K  | Ca | Sc           | Ti  | V  | Cr  | Mn   | Fe    | Co | Ni  | Cu | Zn | Ga           | Ge | As | Se | Br  | Kr   |  |
| 5            | Br | Sr | Y            | Zr  | Nb | Mo  | Tc   | Ru    | Rh | Pd  | Ag | Cd | In           | Sn | Sb | Te | I   | Xe   |  |
| 6            | Cs | Ba | La           | Hf  | Ta | W   | Re   | Os    | Ir | Pt  | Au | Hg | Tl           | Pb | Bi | Po | At  | Rd   |  |
| 7            | Fr | Ra | Ac           |     |    |     |      |       |    |     |    |    |              |    |    |    |     |      |  |
| Lanthanide   | Ce | Pr | Nd           | Pm  | Sm | Eu  | Gd   | Tb    | Dy | Ho  | Er | Tm | Yb           | Lu |    |    |     |      |  |
| Actinide     | Th | Pa | U            | Np  | Pu | Am  | Cm   | Bk    | Cf | Es  | Fm | Md | No           | Lr |    |    |     |      |  |

Abbildung 1.5 Periodensystem der Elemente mit Edelgasen

**Erinnerung**

Der Edelgaszustand einer gefüllten äußeren Elektronenhülle (Edelgaskonfiguration) wird von allen Atomen angestrebt.

## Metall oder Nichtmetall, das ist hier die Frage

Das Ziel, in den stabilen Edelgaszustand zu gelangen, wird entweder durch die Aufnahme oder die Abgabe von Elektronen erreicht (natürlich gilt das nicht für die Edelgase selber). Atome mit wenigen Außenelektronen haben daher das Bestreben, diese abzugeben. Solche Atome werden *Metallatome* genannt. Atome mit vielen Außenelektronen haben das Bestreben, die Schale aufzufüllen. Sie werden *Nichtmetallatome* genannt.

Je weniger Elektronen sich in der Außenschale befinden und je weiter diese vom Kern entfernt ist, desto stärker ist das Bestreben diese Elektronen abzugeben. Das heißt der Metallcharakter nimmt zu. Je mehr Elektronen sich in der Außenschale befinden und je näher sich diese am Kern befinden, desto stärker ist das Bestreben, zusätzliche Elektronen aufzunehmen. Das heißt der Nichtmetallcharakter nimmt zu, wie in Abbildung 1.6 dargestellt ist. Kommt es zu der

Nichtmetallcharakter nimmt zu →

|           | I                            | II                           | III                          | IV                           | V                            | VI                           | VII                         |
|-----------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-----------------------------|
| Periode 1 | ${}^1\text{H}$<br>1,01       |                              |                              |                              |                              |                              |                             |
| Periode 2 | ${}^3\text{Li}$<br>6,94      | ${}^4\text{Be}$<br>9,01      | ${}^5\text{B}$<br>10,81      | ${}^6\text{C}$<br>12,01      | ${}^7\text{N}$<br>14,01      | ${}^8\text{O}$<br>16,00      | ${}^9\text{F}$<br>19,00     |
| Periode 3 | ${}^{11}\text{Na}$<br>22,99  | ${}^{12}\text{Mg}$<br>24,31  | ${}^{13}\text{Al}$<br>26,98  | ${}^{14}\text{Si}$<br>28,08  | ${}^{15}\text{P}$<br>30,97   | ${}^{16}\text{S}$<br>32,08   | ${}^{17}\text{Cl}$<br>35,45 |
| Periode 4 | ${}^{19}\text{K}$<br>39,10   | ${}^{20}\text{Ca}$<br>40,08  | ${}^{31}\text{Ga}$<br>69,72  | ${}^{32}\text{Ge}$<br>72,79  | ${}^{33}\text{As}$<br>74,92  | ${}^{34}\text{Se}$<br>78,96  | ${}^{35}\text{Br}$<br>79,90 |
| Periode 5 | ${}^{37}\text{Rb}$<br>85,47  | ${}^{38}\text{Sr}$<br>87,62  | ${}^{49}\text{In}$<br>114,82 | ${}^{50}\text{Sn}$<br>118,69 | ${}^{51}\text{Sb}$<br>121,75 | ${}^{52}\text{Te}$<br>127,60 | ${}^{53}\text{I}$<br>126,90 |
| Periode 6 | ${}^{55}\text{Cs}$<br>132,91 | ${}^{56}\text{Ba}$<br>226,03 | ${}^{81}\text{Tl}$<br>204,38 | ${}^{82}\text{Pb}$<br>207,20 | ${}^{83}\text{Bi}$<br>208,98 | ${}^{84}\text{Po}$<br>210    | ${}^{85}\text{At}$<br>210   |
| Periode 7 | ${}^{87}\text{Fr}$<br>223    | ${}^{88}\text{Ra}$<br>226,01 |                              |                              |                              |                              |                             |

← Metallcharakter nimmt zu

Metalle    ☐    Halbmetalle    ☐    Nichtmetalle

↑ Metallcharakter nimmt zu

↓ Nichtmetallcharakter nimmt zu

**Abbildung 1.6** Einteilung in Metalle, Halbmetalle und Nichtmetalle im Ausschnitt des Periodensystems der Elemente (ohne Edelgase)

angesprochenen Elektronenabgabe (im Fall der Metallatome) bzw. Elektronenaufnahme (im Fall der Nichtmetallatome), wird das elektrisch neutrale Atom natürlich im Falle der Metalle zum positiven bzw. im Falle der Nichtmetalle zum negativen Ion. Durch ihre Ladung üben diese Ionen eine Kraftwirkung auf ihre Umgebung aus.

#### BEISPIEL

Caesium ist ein chemisches Element mit dem Elementsymbol Cs und der Ordnungszahl 55. Im Periodensystem steht es in der 1. Hauptgruppe und der 7. Periode. Das heißt, dass sich nur ein Elektron auf der Außenschale befindet und dieses weit entfernt vom Kern ist. Damit zählt Caesium nicht nur zu den Metallen, sondern auch zu den extrem reaktiven Metallen. Es reagiert beispielsweise sofort und sehr heftig mit Luft, weshalb es in Glasampullen unter Inertgas aufbewahrt wird.

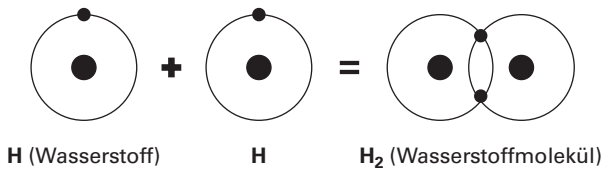
## Bindungsarten

Die chemische Bindung ist die Grundlage dafür, dass sich Moleküle und Kristalle überhaupt bilden können; somit ist sie auch für eine Chemie der Werkstoff von großer Bedeutung. Es fragt sich nun, welche Kombination von Metall- bzw. Nichtmetallatomen zu welcher Bindungsart führt.

### Elektronenpaarbindung

Reagiert ein Nichtmetallatom mit einem weiteren Nichtmetallatom, so haben beide Atome das Bestreben, weitere Elektronen in die äußere Schale aufzunehmen. Dies gelingt durch die sogenannte *Elektronenpaarbindung* – auch *kovalente Bindung* oder *Atombindung* genannt.

So liegen beispielsweise im Wasserstoffgas nicht einzelne Wasserstoffatome vor, sondern Moleküle, bestehend aus zwei gebundenen Wasserstoffatomen. Durch dieses „Elektron-Sharing“ befinden sich beide Wasserstoffatome im Edelgaszustand (siehe Abbildung 1.7). Das heißt beide Wasserstoffatome verfügen nun über zwei Elektronen, womit die äußere Elektronenschale gefüllt ist, wie beim Edelgas Helium.



**Abbildung 1.7** Elektronenpaarbindung am Beispiel eines Wasserstoffmoleküls

Die positiv geladenen Kerne müssten sich ja eigentlich abstoßen, aber die negativen Elektronen halten sie zusammen. Sie bilden ein Elektronenpaar. Elektronenpaarbindungen führen also zu *Molekülen*. Fehlen, wie im Beispiel des Sauerstoffs, zwei Elektronen auf der Außenschale, so kann es auch zur Ausbildung von zwei Elektronenpaarbindungen, das heißt zu einer Doppelbindung kommen.

Weitere Beispiele für bekannte Moleküle sind:

- Methan ( $\text{CH}_4$ )
- Ammoniak ( $\text{NH}_3$ )
- Schwefelwasserstoff ( $\text{H}_2\text{S}$ ).

Es gibt aber auch so genannte Makromoleküle, die aus mehreren 10.000 Einzelatomen bestehen, wie beispielsweise die Desoxyribonukleinsäure (DNA) oder auch die zahlreichen Kunststoffe.

### Erinnerung

In der Werkstofftechnik interessieren uns vor allem die für die verschiedenen Bindungsarten resultierenden Eigenschaften. Für die Elektronenpaarbindung lässt sich hier festhalten:

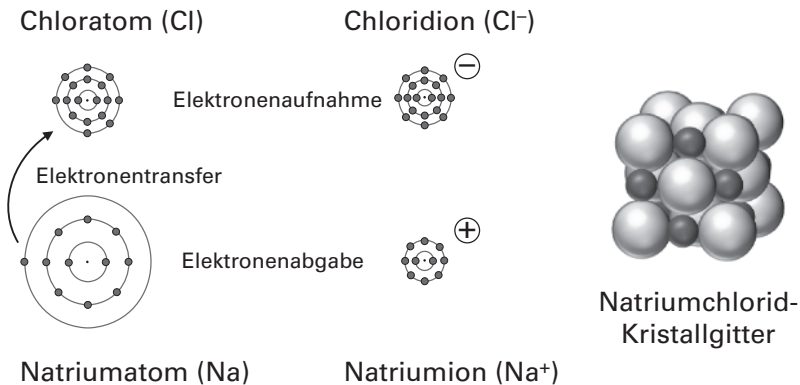
1. Stoffe aus kleinen Molekülen, die durch Elektronenpaarbindung entstanden sind, sind bei Raumtemperatur gasförmig oder flüssig; Beispiele hierfür sind Methan, Ammoniak, Wasser oder Alkohol.
2. Stoffe aus großen Molekülen, die durch Elektronenpaarbindung entstanden sind, wie beispielsweise Kunststoffe, sind bei Raumtemperatur fest.
3. Kristalle – also Stoffe mit einer klaren Periodizität in alle drei Raumrichtungen – in denen die Atome durch Elektronenpaarbindung gebunden sind, sind außerordentlich hart. Bekanntestes Beispiel ist hier Diamant, bei dem es sich um ein Kristallgitter aus Kohlenstoffatomen in Elektronenpaarbindung handelt.

## Ionenbindung

Was passiert aber, wenn ein Nichtmetallatom auf ein Metallatom trifft? Hier gibt es offenbar einen Partner, der sich freut, sein Elektron loszuwerden und einen, der es gerne aufnimmt. Dann können ein oder auch mehrere Elektronen von einem Atom auf ein anderes Atom übergehen, so dass sich entsprechend positiv oder negativ geladene Teilchen bilden, die so genannten Ionen. Die resultierende Bindungsart heißt demzufolge Ionenbindung. Sie liegt bei der Mehrzahl der nichtmetallischen anorganischen Stoffe vor.

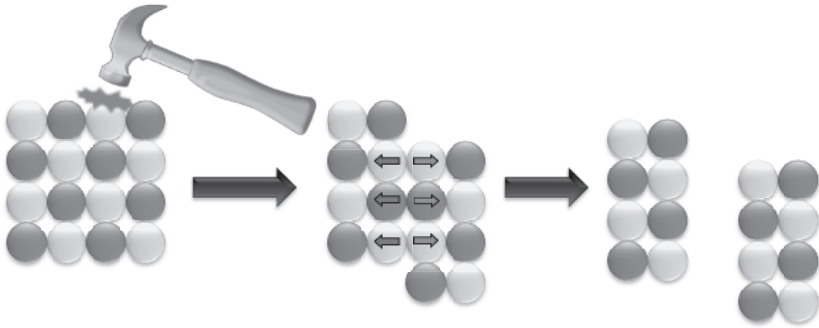
### BEISPIEL

Kochsalz ist chemisch gesehen Natriumchlorid. Hier wird das vom Natriumatom abgegebene Elektron von einem Chloratom aufgenommen; es entstehen Natrium- und Chloridionen (siehe Abbildung 1.8). Im Festkörper bewirken die elektrostatischen Kräfte, dass jeweils ein positiv geladenes *Kation* und ein negativ geladenes *Anion* aufeinander folgen.



**Abbildung 1.8** Ionenbindung am Beispiel von Kochsalz (Natriumchlorid)

Wie in Abbildung 1.9 zu erkennen, hat die Verschiebung eines Teils der Ionen um einen Atomabstand zur Folge, dass sich die Kationen bzw. die Anionen gegenüberstehen. Die aufgrund der gleichnamigen Ladungen abstoßenden Kräfte zerstören daraufhin den Kristall.



**Abbildung 1.9** Ionenbindung unter Krafteinwirkung

### Erinnerung

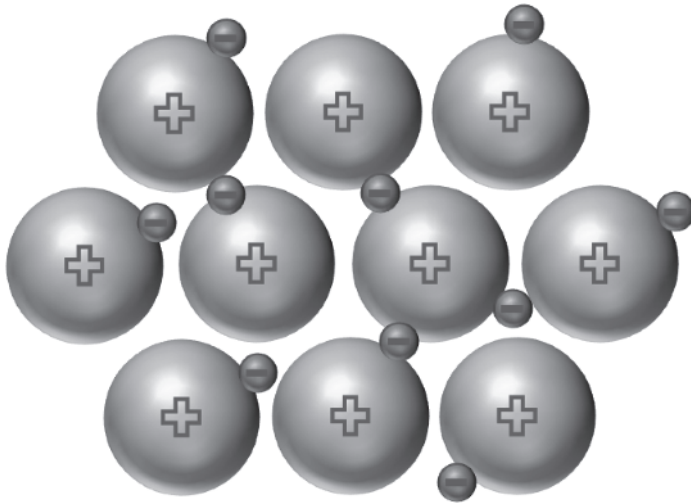
Eine plastische Verformbarkeit ist folglich bei der Ionenbindung nicht zu erwarten.

## Metallbindung

Die letzte Kombinationsmöglichkeit ist die Reaktion von Metallatomen untereinander. Wie bereits erläutert wurde, wollen Metallatome grundsätzlich Elektronen abgeben, um in den Edelgaszustand zu gelangen so dass sie positiv geladene Ionen bilden. Wechselwirken nun Metallatome mit Metallatomen, so sind keine Atome vorhanden, die Elektronen aufnehmen würden. So bleiben die abgegebenen Elektronen ungebunden. Diese frei beweglichen Elektronen der Außenschale (auch *Valenzelektronen* genannt) bilden ein Elektronengas. Die Metallbindung ist also gekennzeichnet durch positiv geladene Atomrümpfe, die mit dem Elektronengas auf Grund der unterschiedlichen Ladung wechselwirken (siehe Abbildung 1.10).

### Erinnerung

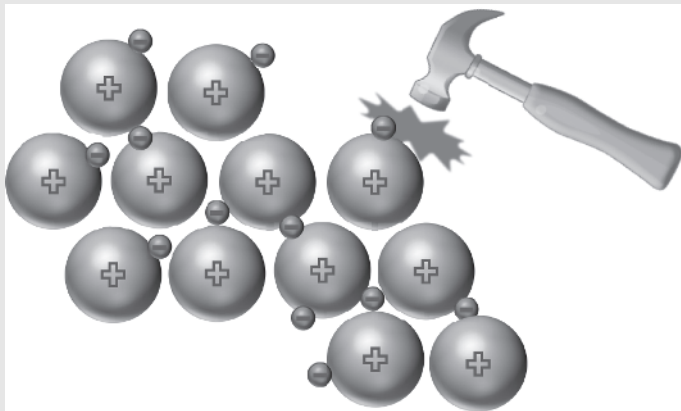
*Die gute elektrische und thermische Leitfähigkeit der Metalle beruht auf der freien Beweglichkeit der Valenzelektronen im Metall*



**Abbildung 1.10** Metallbindung aufgrund der Wechselwirkung zwischen den positiven Atomrümpfen und dem Elektronengas

### Erinnerung

Anders als beim Ionengitter bewirkt ein Platzwechsel einzelner Atomrümpfe in einem Metallgitter keine Veränderung der Ladungsverteilung zwischen den Atomrümpfen und dem Elektronengas. Die Atome lassen sich also gegeneinander verschieben, ohne dass es zu einer Zerstörung des Gitters kommen muss (siehe Abbildung 1.11). Dies erklärt die gute bis sehr gute plastische Verformbarkeit der metallischen Werkstoffe.



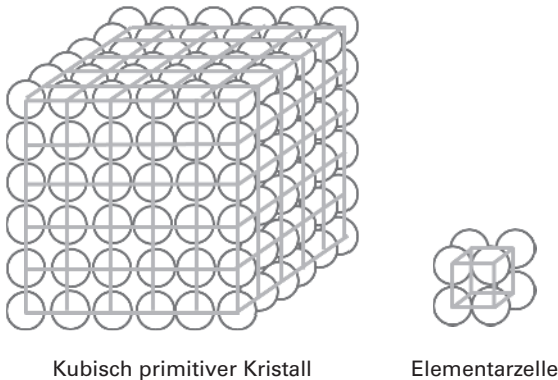
**Abbildung 1.11** Plastische Verformung metallischer Werkstoffe

Wie bereits erwähnt, beschäftigen sich die ersten sechs Kapitel ausschließlich mit Stählen und Eisenwerkstoffen, so dass im Folgenden die Metallbindung und die sich daraus ableitenden Strukturen und Eigenschaften im Vordergrund stehen.

## Gittertypen

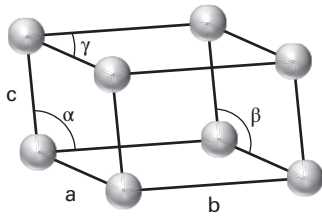
Kristalle, gleich ob als Atom-, Ionen- oder Metallkristalle, können in unterschiedlicher Weise aufgebaut sein. Um den Aufbau von Kristallen zu verstehen, stellen Sie sich zunächst vor, dass die Mitten der Teilchen durch Linien verbunden sind, so dass ein räumliches Gitter entsteht. Die kleinste immer wiederkehrende Einheit dieses Gitters, die sogenannte *Elementarzelle*, beschreibt nun den kristallinen Aufbau.

Abbildung 1.12 zeigt ein kubisch primitives Kristallgitter, wie Sie es bereits in Abbildung 1.8 beim Kochsalz kennengelernt haben. Hierbei sitzt jeweils ein Atom auf den Ecken eines Kubus – also eines Würfels.



**Abbildung 1.12** Kristallgitter und Elementarzelle

Die verschiedenen Elementarzellen werden durch die Seitenlängen der Elementarzelle  $a$ ,  $b$  und  $c$ , die sogenannten *Gitterparameter*, und die Winkel  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$ , die *Gitterwinkel*, gekennzeichnet (siehe Abbildung 1.13). Für Metalle liegen die Gitterparameter bei gerade einmal 0,25 – 0,5 nm, was kleiner als ein millionstel Millimeter ist.



**Abbildung 1.13** Gitterparameter und Gitterwinkel

Nach der Form der Gitterzellen unterscheidet man sieben verschiedene Kristallsysteme, von denen das kubische, das tetragonale und das hexagonale System für metallische Werkstoffe am wichtigsten sind.

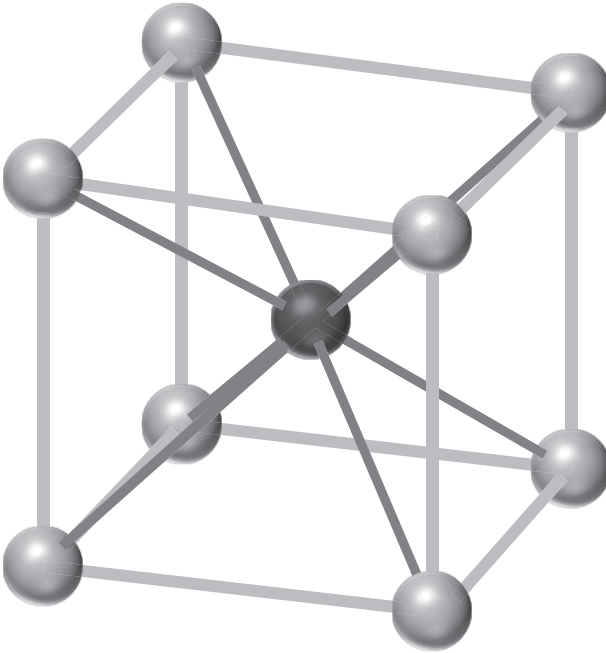
Die bisher vorgestellten Kristallgitter, bei denen nur die Eckpunkte der Elementarzellen mit Atomen besetzt sind, werden primitive Gitter genannt. Diese finden sich häufig bei Ionengittern, aber nicht bei Kristallgittern metallischer Werkstoffe. Hier zeichnen sich die Elementarzellen durch zusätzliche Atome in den Schnittpunkten der Flächendiagonalen oder der Raumdiagonalen aus.

#### Erinnerung

Die wichtigsten bei Metallen vorkommenden Gittertypen sind das **kubisch raumzentrierte** (krz) Gitter, das **kubisch flächenzentrierte** (kfz) und das **hexagonale Gitter dichtester Kugelpackung** (hdp).

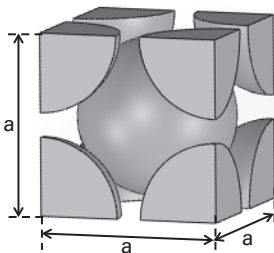
### Das kubisch raumzentrierte Gitter

Das kubisch raumzentrierte Gitter (krz) besteht neben den acht Atomen in den Würfecken zusätzlich aus einem Atom in der Würfelmitte am Schnittpunkt der Raumdiagonalen – daher raumzentriert (siehe Abbildung 1.14). Da es sich um eine kubische Elementarzelle handelt, sind alle Seitenlängen der Elementarzelle gleich, d.h.  $a = b = c$ , und alle Winkel ebenfalls gleich, d.h.  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Das kubisch raumzentrierte Gitter wird auch Wolfram-Typ genannt, da Wolfram ein Metall mit krz-Gitter ist. Andere Metalle, die als Festkörper im krz-Gitter vorliegen, sind  $\alpha$ -Eisen, Chrom, Niob, Molybdän und Tantal.



**Abbildung 1.14** Kubisch raumzentriertes Gitter (krz)

Da sich das krz-Gitter die Atome auf den Würfecken mit den angrenzenden Elementarzellen teilen muss, besteht es aus insgesamt 2 Atomen (siehe Abbildung 1.15).



**Abbildung 1.15** Elementarzelle eines kubisch raumzentrierten Gitters

So können wir folgende Berechnung anstellen:

$$\begin{aligned}
 n &= \left( 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 \right) \text{ Atome} = 2 \text{ Atome} \\
 V_E &= a^3 \\
 V_A &= \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3 \\
 P &= n \cdot \frac{V_A}{V_E} \cdot 100 \%
 \end{aligned}$$

$V_E$  bezeichnet das Volumen der Elementarzelle. Da es sich um einen Würfel handelt, berechnet sich das Volumen zu  $a^3$ .  $V_A$  ist das Volumen des Atoms; es berechnet sich nach der bekannten Formel zur Bestimmung eines Kugelvolumens. Die Packungsdichte  $P$ , das heißt die Raumerfüllung der Elementarzellen durch Atome, ergibt sich aus der Anzahl der Atome in der Elementarzelle  $n$ , multipliziert mit dem Volumen eines Atoms und dividiert durch das Volumen der Elementarzelle.

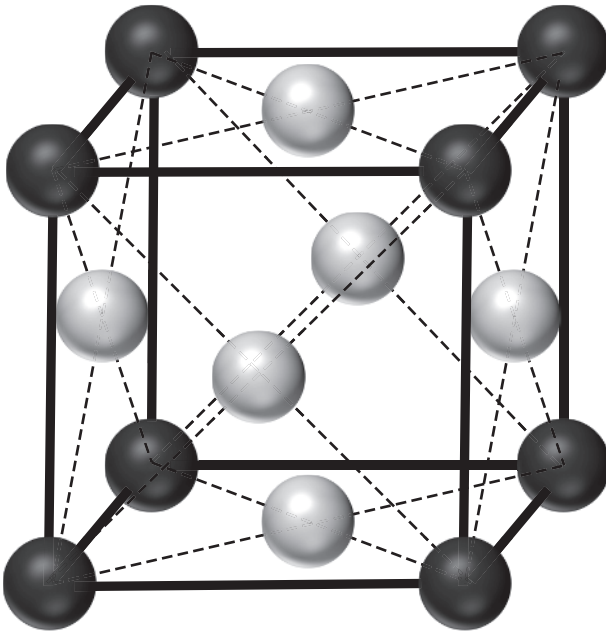
Da die Raumdiagonale dem Vierfachen des Atomradius entspricht, lässt sich  $a$  durch  $R$  ausdrücken:

$$a = \left( \frac{4}{\sqrt{3}} \right) \cdot R$$

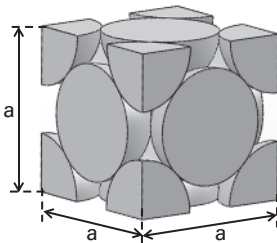
Dadurch ergibt sich sowohl im Ausdruck für das Volumen des Atoms als auch für das Volumen der Elementarzelle ein Term  $R^3$ , so dass er sich aus der Gleichung für die Packungsdichte herauskürzt und diese sich zu ca. 68 % ergibt.

## Das kubisch flächenzentrierte Gitter

Auch beim kubisch flächenzentrierten Gitter (kfz) handelt es sich um eine kubische Elementarzelle, also sind alle Seitenlängen der Elementarzelle gleich, das heißt  $a = b = c$ , ebenso sind alle Winkel gleich, also  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Es besteht neben den 8 Atomen in den Würfecken zusätzlich aus einem Atom in jeder Würfelfläche am Schnittpunkt der Flächendiagonalen – daher stammt der Begriff flächenzentriert (siehe Abbildung 1.16 und Abbildung 1.17). Das kubisch flächenzentrierte Gitter wird auch Kupfer-Typ genannt, da Kupfer ein Metall mit kfz-Gitter ist. Andere Metalle, die als Festkörper im kfz-Gitter vorliegen, sind  $\gamma$ -Fe, Nickel, Silber und Gold.



**Abbildung 1.16** Kubisch flächenzentriertes Gitter (kfz)

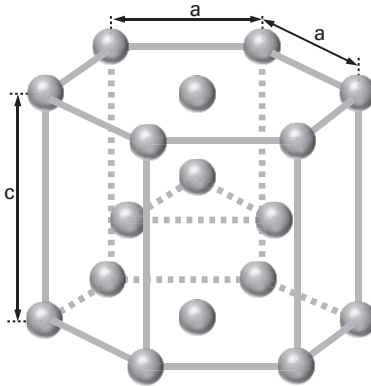


**Abbildung 1.17** Elementarzelle eines kubisch flächenzentrierten Gitters

Aus ähnlichen Überlegungen wie beim kubisch raumzentrierten Gitter ergibt sich eine Packungsdichte von ca. 74 %.

### Die hexagonal dichteste Kugelpackung

Bei der hexagonal dichtesten Kugelpackung (hdp) bildet ein Sechseck mit Atomen auf den Ecken und in der Flächenmitte die Grund- und Deckfläche. Dazwischen befinden sich drei weitere Atome (siehe Abbildung 1.18). Auch



**Abbildung 1.18** Hexagonal dichteste Kugelpackung (hdp)

wenn diese Anordnung dichteste Kugelpackung genannt wird, entspricht ihre Raumauffüllung mit 74 % der beim kubisch flächenzentrierten Gitter.

Als prominentester Vertreter gilt Magnesium, weshalb auch oft von der Magnesium-Typ gesprochen wird, wenn man die hexagonal dichteste Kugelpackung beschreibt. Andere Vertreter mit hexagonal dichtester Kugelpackung sind Zink und Titan.

Betrachtet man die Einteilung der Metalle nach der Kristallstruktur in Tabelle 1.1, erkennt man, dass einige Metalle gleich bei mehreren Kristallstrukturen genannt werden. Solche Metalle, die offenbar in verschiedenen Modifikationen vorliegen können, werden *polymorph* genannt.

| Kubisch raumzentriert krz | Kubisch flächenzentriert kfz | Hexagonal hdp |
|---------------------------|------------------------------|---------------|
| Eisen                     | Eisen                        |               |
| Titan                     |                              | Titan         |
| Lithium                   | Aluminium                    | Cadmium       |
| Molybdän                  | Blei                         | Cobalt        |
| Niob                      | Gold                         | Magnesium     |
| Tantal                    | Kupfer                       | Zink          |
| Vanadium                  | Nickel                       |               |
| Wolfram                   | Palladium                    |               |
|                           | Platin                       |               |
|                           | Silber                       |               |

**Tabelle 1.1** Einteilung der Metalle nach der Kristallstruktur

## Gitterfehler

Bei den oben beschriebenen Kristallgittern handelt es sich um Idealkristalle mit einem unveränderlichen, exakt periodischen Aufbau aus identischen Bausteinen. Ein realer Kristall zeichnet sich dagegen durch zahlreiche Gitterfehler aus, die den exakten periodischen Aufbau stören.

Gitterfehler können sich positiv oder auch negativ auf die Werkstoffeigenschaften auswirken. Da die meisten dieser Fehler gewollt oder auch ungewollt bei der Werkstoffverarbeitung und/oder Weiterverarbeitung eingebracht werden, ist die Kenntnis von deren Einfluss auf die Werkstoffeigenschaften für den Maschinenbauingenieur von entscheidender Bedeutung.

Entsprechend ihrer Form werden die Gitterfehler in

- Nulldimensionale oder Punktfehler,
- Eindimensionale oder Linienfehler,
- Zweidimensionale oder Flächenfehler und
- Dreidimensionale oder Volumenfehler eingeteilt.

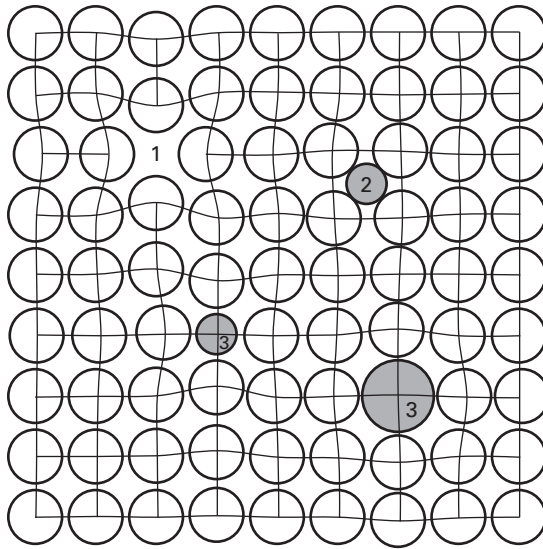
Diese Fehler im Folgenden ausführlich erläutert.

### Auf den Punkt gebracht – Nulldimensionale Gitterfehler

Nulldimensionale Gitterfehler haben die Ausdehnung eines einzelnen Atoms und sind damit auf einen einzelnen Gitterplatz beschränkt. Es sind drei Typen von nulldimensionalen Gitterfehlern bekannt:

- Leerstellen
- Zwischengitteratome
- Substitutionsatome

Bei *Leerstellen* (Abbildung 1.19/1) handelt es sich um Gitterplätze, die nicht von einem Atom besetzt sind. Die Leerstellendichte steigt exponentiell mit der Temperatur an; sie erhöht sich bis zur Schmelztemperatur um ca. acht Zehnerpotenzen im Vergleich zur Raumtemperatur. Beim Schmelzpunkt beträgt die Leerstellendichte ca.  $10^{-4}$ , was ca. 100 Millionen Leerstellen pro  $\text{mm}^2$  Gitterebene entspricht.



**Abbildung 1.19** Nulldimensionale Gitterfehler, 1: Leerstelle, 2: Zwischengitteratom, 3: Substitutionsatom

Bei *Zwischengitteratomen* (Abbildung 1.19/2) liegen die Atome nicht auf den Gitterplätzen, sondern zwischen diesen. Kommt ein Zwischengitteratom dadurch zustande, dass ein Atom seinen Gitterplatz verlässt und dort eine Leerstelle entsteht, so nennt man diese Anordnung nach dem russischen Physiker Jakow Iljitsch Frenkel *Frenkel-Defekt*.

Da alle anderen Atomsorten entweder größer oder kleiner sind, bilden auch Fremdatome Fehler im Gitter. Nehmen die Fremdatome Gitterplätze ein, ersetzen sie also Atome der Matrix, so heißen sie *Substitutionsatome* (Abbildung 1.19/3). Um gezielt Einfluss auf die Werkstoffeigenschaften zu nehmen, werden zum Teil auch größere Mengen weiterer Atomarten im Gitter gelöst. Hier handelt es sich dann in der Regel nicht um Gitterfehler, sondern um sogenannte *Mischkristalle*. Sie werden weiter unten ausführlich erläutert.

Zwischengitteratome in Form von Einlagerungsatomen werden uns als Kohlenstoffeinlagerung im Eisengitter beim Thema Stahl in den Kapiteln 4–6 noch näher beschäftigen.