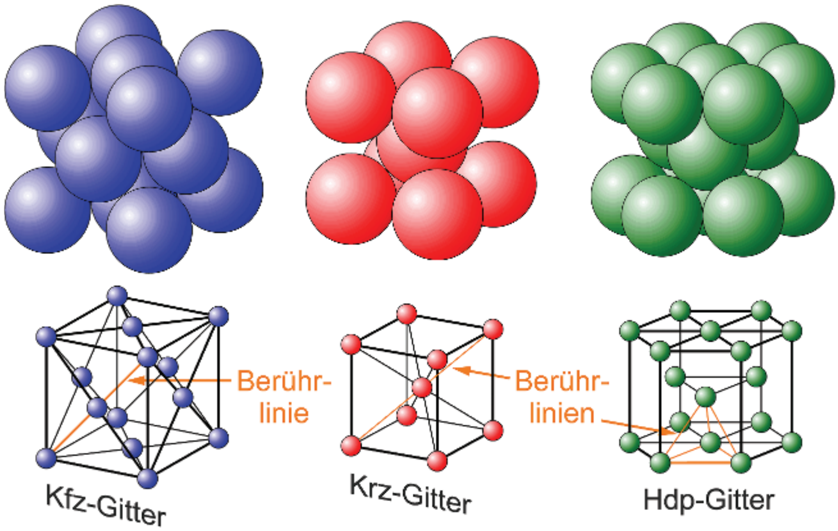
Lösung zur Aufgabe 6

a) Am häufigsten: kubisch-flächenzentriertes (kfz) Gitter, kubisch-raumzentriertes (krz) Gitter und hexagonal dichtest gepacktes (hdp) Gitter.

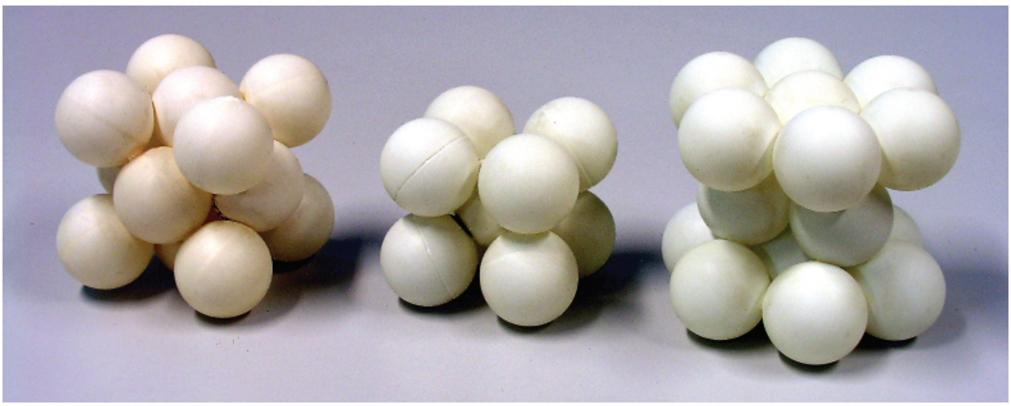
b) Das sind die »Skizzen« der Kristallgitter:



c) Beim kfz-Gitter berühren sich die Atome entlang der **Flächen**diagonalen der Elementarzelle (und in noch anderen Richtungen), beim krz-Gitter entlang der **Raum**diagonalen. Beim hdp-Gitter bilden die »Berührlinien« die Kanten eines **Tetraeders**, einem räumlichen Gebilde aus vier gleichseitigen Dreiecken.

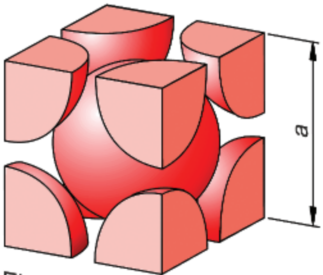
d) **Kfz**-Struktur haben: Al, Cu, Ni; **krz**-Struktur weisen auf: Cr, Mo, Fe (bei Raumtemperatur); **hdp**-Struktur: Zn, Mg.

e) So sehen meine Tischtennisball-Gittermodelle aus:

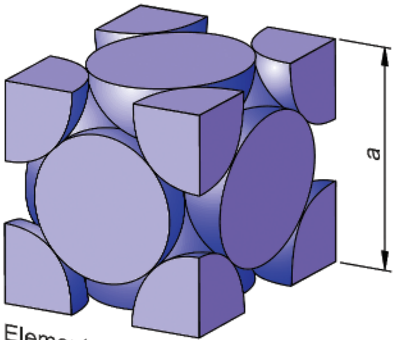


Lösung zur Aufgabe 7

Das sind die »echten« Elementarzellen:



Elementarzelle krz-Gitter



Elementarzelle kfz-Gitter

Lösung zur Aufgabe 8

- ✔ **Erste Überlegung:** Welche Kristallstruktur hat Eisen bei Raumtemperatur? Es ist die krz-Struktur.
- ✔ **Zweite Überlegung:** In welcher Richtung berühren sich die Atome, wo gibt es Lücken? Die Atome berühren sich entlang der **Raumdiagonalen**. Deren Länge können Sie logisch nach dem Satz des Pythagoras berechnen oder aus einer Formelsammlung entnehmen, sie beträgt $\sqrt{3} \cdot a_{Fe}$. Zwischen zwei benachbarten Eckatomen bleibt eine kleine Lücke.
- ✔ **Dritte Überlegung:** Wie viele Atomdurchmesser passen in eine Raumdiagonale? Das sind zwei (ein halber, ein ganzer und noch ein halber, also $2d_{Fe}$).
- ✔ Und jetzt die **allgemeine Lösung**. Mathematisch lautet die zweite und dritte Überlegung:

  Länge der Raumdiagonale = zwei Atomdurchmesser: $\sqrt{3} \cdot a_{Fe} = 2d_{Fe}$.

  Nach d_{Fe} aufgelöst erhalten Sie: $d_{Fe} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_{Fe}$.
- ✔ **Ganz konkret** ergibt sich: $d_{Fe} = \frac{\sqrt{3}}{2} 0{,}287 \text{ nm} = 0{,}249 \text{ nm}$.

Lösung zur Aufgabe 9

Die Lösung ist analog zur vorhergehenden Aufgabe, daher sind die Erklärungen etwas gekürzt.

- ✔ Die Kristallstruktur ist kfz.
- ✔ Die Atome berühren sich entlang der Flächendiagonalen, sie ist $\sqrt{2} \cdot a_{Cu}$ lang.

- ✔ In die Flächendiagonale passen wieder ein halber, ein ganzer und noch ein halber Atomdurchmesser, das sind zwei.
- ✔ Mathematisch allgemein: $\sqrt{2} \cdot a_{Cu} = 2d_{Cu}$, nach d_{Cu} aufgelöst: $d_{Cu} = \frac{\sqrt{2}}{2} a_{Cu}$.
- ✔ Konkret: $d_{Cu} = \frac{\sqrt{2}}{2} 0{,}361 \text{ nm} = 0{,}255 \text{ nm}$.

Lösung zur Aufgabe 10

Sie müssen die Zahl der Atome ausrechnen, die sich im **Inneren** der Elementarzelle befinden. Bei denjenigen Atomen, die ganz im Inneren sind, ist das kein Problem, die gehören **vollständig** dazu. Diejenigen Atome, die nicht ganz im Inneren sind, nehmen Sie **anteilig**. Anschaulich sieht man das auch ganz gut anhand der Skizzen zur »echten« Elementarzelle.

a) **Krz-Gitter**

- Das zentrale Atom ist ganz enthalten, ergibt 1 Atom.
- Die Eckatome zählen aber nur zu je 1/8 zur Elementarzelle, und weil es 8 davon hat, und $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ ist, ergibt das insgesamt wieder 1 Atom.
- In der Summe sind also 1 + 1 = **2 Atome** in der Elementarzelle.

b) **Kfz-Gitter**

- 8 Eckatome zu je 1/8 ergeben 1 Atom.
- Die flächenzentrierten Atome zählen je zur Hälfte zur Elementarzelle, und weil es 6 davon gibt, erhält man $6 \cdot \frac{1}{2} = 3$, also 3 Atome.
- In der Summe sind 1 + 3 = **4 Atome** in der Elementarzelle enthalten.

Kurioserweise sitzt beim kfz-Gitter kein Atom vollständig in der Elementarzelle drin.

Lösung zur Aufgabe 11

a) **Krz-Gitter**

- Das **Volumen der Elementarzelle** ist das Würfelvolumen:

$$V_{EZ} = a^3 \tag{1}$$

- Als Nächstes nutzen Sie den Zusammenhang zwischen Atomdurchmesser d und a aus den vorigen Aufgaben. Die Indizes lassen Sie weg, es geht ja nicht nur ums Eisen:

$$d = \frac{\sqrt{3}}{2} a \tag{2}$$

- Jedes Atom ist eine Kugel, und das Kugelvolumen beträgt allgemein (in einer Formelsammlung nachsehen) $V = \frac{\pi}{6}d^3$. In der krz-Elementarzelle sind zwei Atome enthalten. Mit Gleichung (2) erhalten Sie für das **Volumen aller Atome** in der Elementarzelle:

$$V_{\text{Atome}} = 2\frac{\pi}{6}d^3 = 2\frac{\pi}{6}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)^3 = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}a^3 \qquad (3)$$

- Nun sind Sie fast fertig. Nehmen Sie die Gleichungen (1) und (3), dann ergibt sich die Packungsdichte im krz-Gitter:

$$\eta_{\text{krz}} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\frac{\pi\sqrt{3}}{8}a^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$$

- Und wenn Sie diesen Ausdruck konkret ausrechnen, erhalten Sie:

$$\eta_{\text{krz}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0{,}680$$

Das bedeutet, dass im krz-Gitter der mit Atomen ausgefüllte Anteil 0,680 ist, das sind 68,0 %.

a) Kfz-Gitter

- Das **Volumen der Elementarzelle** ist wieder

$$V_{\text{EZ}} = a^3 \qquad (1)$$

- Den Zusammenhang zwischen Atomdurchmesser d und a im kfz-Gitter kennen Sie auch schon:

$$d = \frac{\sqrt{2}}{2}a \qquad (2)$$

- Jedes Atom hat ein Volumen von $V = \frac{\pi}{6}d^3$, in der kfz-Elementarzelle sind vier davon enthalten. Für das **Volumen aller Atome** in der Elementarzelle erhalten Sie mit Gleichung (2):

$$V_{\text{Atome}} = 4\frac{\pi}{6}d^3 = 4\frac{\pi}{6}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a\right)^3 = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}a^3 \qquad (3)$$

- Die Packungsdichte im kfz-Gitter bekommen Sie mit den Gleichungen (1) und (3):

$$\eta_{\text{kfz}} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\frac{\pi\sqrt{2}}{6}a^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}$$

- Als Zahlenwert: $\eta_{\text{kfz}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0{,}740$.

74,0 % des Raums sind also »erfüllt«, und zwar mit starren, massiven Kugeln, das war die vereinfachende Annahme. Mehr geht nicht, das ist die theoretisch und praktisch dichtest mögliche Packung von Kugeln im Raum.

Lösung zur Aufgabe 12

Das sind die Zähigkeit und die Fähigkeit, Legierungen zu bilden.

- ✔ Werkstoffe mit kfz-Gitter (wie Aluminium) sind auch bei sehr tiefen Temperaturen noch zäh, sie lassen sich noch gut plastisch verformen. Krz (beispielsweise Eisen) und hdp aufgebaute Werkstoffe (wie Zink) werden zu tiefen Temperaturen hin spröde.
- ✔ Die Fähigkeit, Legierungen zu bilden, unterscheidet sich beim kfz- und krz-Gitter sehr. Die Unterschiede sieht man besonders deutlich beim Eisen-Kohlenstoff-Zustandsdiagramm.

Lösung zur Aufgabe 13

a) Unter Polymorphie versteht man die Erscheinung, dass ein Werkstoff in Abhängigkeit der Temperatur (und auch des Drucks) verschiedene Kristallgitter aufweist.

b) Keine Polymorphie haben Aluminium, Kupfer, Chrom. Polymorph sind Eisen und Titan.

c) Das (hoffentlich sinnvolle) Diagramm finden Sie in Abbildung 1.6.

d) Die Polymorphie ist die Grundlage für viele Wärmebehandlungen der Stähle, beispielsweise das Härten.

Lösung zur Aufgabe 14

Der Eisenstab müsste sich bei der Umwandlung vom α- ins γ-Eisen schlagartig zusammenziehen, denn die Packungsdichte im kfz aufgebauten γ-Eisen ist deutlich höher als im krz aufgebauten α-Eisen. Oder: Die gleiche Zahl von Atomen braucht dichter gepackt weniger Platz. Wenn man also die Länge eines Eisenstabs bei Temperaturerhöhung misst, so dehnt er sich zunächst »ganz normal« aus, so wie es (fast) alle Werkstoffe tun. Und wenn sich im Inneren das Kristallgitter von krz nach kfz ändert, dann äußert sich das in einer plötzlichen Längen- und Volumenabnahme. Das ist übrigens eine klasse Methode, Kristallgitterumwandlungen auf einfache Art zu messen.

Und nun zur relativen Volumenänderung bei der Umwandlung. Nennen Sie das Volumen des Stabs im krz-Gitter V_{krz}. Das Volumen im kfz-Gitter nennen Sie analog V_{kfz}. Die **relative Volumenänderung** ist dann:

$$\frac{\text{Volumenänderung}}{\text{ursprüngliches Volumen}} = \frac{\text{Volumen nachher} - \text{Volumen vorher}}{\text{Volumen vorher}} = \frac{V_{kfz} - V_{krz}}{V_{krz}} \qquad (1)$$

Wie erhalten Sie jetzt V_{kfz} und V_{krz}? Nehmen Sie hierzu die allgemeine Definition der Packungsdichte:

$$\eta = \frac{\text{Volumen aller Atome}}{\text{Volumen der Probe}} = \frac{V_{Atome}}{V_{kfz/krz}}$$

Im **kfz-Gitter** ist die Packungsdichte $\eta_{kfz} = \frac{V_{Atome}}{V_{kfz}}$. Nach V_{kfz} aufgelöst erhalten Sie:

$$V_{kfz} = \frac{V_{Atome}}{\eta_{kfz}} \tag{2}$$

Im **krz-Gitter** ist die Packungsdichte $\eta_{krz} = \frac{V_{Atome}}{V_{krz}}$. Nach V_{krz} aufgelöst erhalten Sie:

$$V_{krz} = \frac{V_{Atome}}{\eta_{krz}} \tag{3}$$

Setzen Sie nun die beiden Gleichungen (2) und (3) in Gleichung (1) ein, so ergibt sich das gesuchte Resultat:

$$\text{Relative Volumenänderung} = \frac{V_{kfz} - V_{krz}}{V_{krz}} = \frac{\frac{V_{Atome}}{\eta_{kfz}} - \frac{V_{Atome}}{\eta_{krz}}}{\frac{V_{Atome}}{\eta_{krz}}} = \frac{\frac{1}{\eta_{kfz}} - \frac{1}{\eta_{krz}}}{\frac{1}{\eta_{krz}}} = \frac{\eta_{krz}}{\eta_{kfz}} - 1$$

Das Volumen der Atome V_{Atome} ist in beiden Kristallgittern gleich, jedenfalls nehmen wir das bei der Berechnung an. Die Größe V_{Atome} kürzt sich deswegen aus der oberen Gleichung heraus.

Das wäre die allgemeine Gleichung, und die können Sie sogar für jede Art der Polymorphie anwenden. Im Fall des Eisens setzen Sie jetzt noch die Ergebnisse der vorhergehenden Aufgaben für die Packungsdichte ein und erhalten dann:

$$\text{Relative Volumenänderung} = \frac{\eta_{krz}}{\eta_{kfz}} - 1 = \frac{\frac{\pi\sqrt{3}}{8}}{\frac{\pi\sqrt{2}}{6}} - 1 = \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} - 1 = -0{,}0814$$

In Worten: Die relative Volumenänderung ist –0,0814. Oder prozentual ausgedrückt: Das Volumen schrumpft um 8,14 %. Tatsächlich misst man in Experimenten viel weniger Volumenschrumpfung; das ist ein Hinweis darauf, dass die Atome in Wirklichkeit eben doch keine starren, massiven Kugeln sind.

Lösung zur Aufgabe 15

Man teilt sie ein in die *nulldimensionalen (punktförmigen)*, die *eindimensionalen (linienförmigen)* und die *zweidimensionalen (flächenhaften) Kristallbaufehler*, die Gliederungsübersicht zeigt Abbildung 1.7.

Lösung zur Aufgabe 16

Das sind die *Leerstellen*, *Zwischengitteratome* und *Substitutionsatome*, siehe Abbildung 1.8. Die Leerstellen ermöglichen die Diffusion; die Zwischengitter- und die Substitutionsatome treten bei Legierungen auf.

Lösung zur Aufgabe 17

a) Das ist die *Versetzung*.

b) *Stufen- und Schraubenversetzung* sind die beiden Varianten.

c) Wählen Sie die Stufenversetzung, die lässt sich leichter zeichnen, und ganz so umfangreich wie links in Abbildung 1.9 muss Ihre Skizze nicht aussehen.

d) Durch Einfügen einer Halbebene von Atomen in einen perfekten Kristall. Oder durch das Gegenteil, das Herausnehmen einer Halbebene mit Neuknüpfen der Bindungen. Interessant ist, dass das Gegenteil zum (grundsätzlich) gleichen Ergebnis führt.

e) Versetzungen ermöglichen es einem Kristall, sich plastisch zu verformen. Je nachdem, wie leicht oder schwer das geht, liegt ein weicher, weniger fester Werkstoff vor oder ein härterer, festerer.

Lösung zur Aufgabe 18

a) Der üblichste Mechanismus ist die Bewegung von Versetzungen; auch hier dürfen Ihre Skizzen einfacher sein als in Abbildung 1.10 dargestellt.

b) Er fällt den Kristallen deswegen leicht, weil sie immer nur **eine** Reihe von Bindungen direkt am Kern lösen müssen, und nicht **alle** Bindungen innerhalb einer Kristallebene. Das ist so, als ob Sie ein ganzes Bündel von Stäben einzeln durchbrechen dürfen und nicht das ganze Bündel auf einmal.

Lösung zur Aufgabe 19

Es sind die *Korngrenzen*, *Zwillingskorngrenzen* und *Stapelfehler*, wie in Abbildung 1.11 dargestellt. Die eigenen Handzeichnungen dürfen übrigens ruhig etwas vereinfacht sein.

Die Hauptbedeutung der zweidimensionalen Kristallbaufehler liegt in der Beeinflussung der mechanischen Eigenschaften. Bei niedrigen Temperaturen (relativ zum Schmelzpunkt) wirken sie sich meistens günstig aus, bei höheren Temperaturen eher ungünstig.

Lösung zur Aufgabe 20

a) Da handelt es sich fast nur um vielkristalline Werkstoffe, und das sieht man ihnen meistens nicht an. Die Kristalle sind zu klein, um sie mit dem bloßen Auge zu sehen, außerdem muss man sie in geeigneter Weise sichtbar machen.

b) Bei vielkristallinen Solarzellen und feuerverzinkten Teilen im Freien.

c) Bei einkristallinen Turbinenschaufeln, die für höchste Anwendungstemperaturen vorgesehen sind, auch bei Halbleitern in der Elektrotechnik.

Lösung zur Aufgabe 21

Beh.	a)	b)	c)	d)	e)	f)	g)	h)	i)	j)	k)	l)	m)	n)	o)	p)	q)	r)	s)	t)	u)	v)	w)
R.	✓	✓	✓				✓				✓	✓	✓	✓		✓			✓	✓	✓	✓	
N. r.				✓	✓	✓		✓	✓	✓					✓		✓	✓					✓