



IN DIESEM KAPITEL

Wie sich Atome binden

Welche Kristallarten es gibt und wie sie sich ändern können

Die Kristallbaufehler und ihre Folgen

Kapitel 1

Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle

Die Atome, aus denen die Werkstoffe bestehen, legen mit ihrem Charakter und ihren Eigenschaften alles fest, was einen Werkstoff so ausmacht. Wie die Atome sich untereinander binden, wie sie sich anordnen, welche Eigenschaften der Werkstoff dann insgesamt hat, welche Vorzüge und Marotten er in der Praxis zeigt, und vieles andere resultiert daraus. Die folgenden Aufgaben decken natürlich nicht alles ab, das wäre vermessen, aber ein paar wichtige Aspekte, die bei den Werkstoffen in der Praxis eine große Rolle spielen.

Zunächst geht es ganz vorsichtig mit den Atomen los. Die ersten Aufgaben sind nicht allzu schwer, sie dienen zum »Aufwärmen«. So nach und nach wird es dann anspruchsvoller.

Von Atomen, ihren Bindungen und ihrer Anordnung

Aufgabe 1

Wie sind die Atome in ihrem Inneren aufgebaut? Gehen Sie nur ganz grob darauf ein, die detaillierte Beschreibung überlassen wir der Atomphysik.

Aufgabe 2

- Beschreiben Sie den Begriff *Bindung zwischen Atomen* mit einigen grundlegenden Überlegungen. Was passiert, wenn man zwei Atome eines Werkstoffs sich gedanklich langsam annähern lässt und die Kräfte zwischen ihnen misst?
- Was wäre der Fall, wenn es zwischen Atomen nur abstoßende Kräfte gäbe?



30 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

Aufgabe 3

- Zeichnen Sie ein sinnvolles Diagramm, das die Kräfte zwischen zwei Atomen eines Werkstoffs in Abhängigkeit des Atomabstands darstellt. Beschriften Sie die Achsen und alle eingezeichneten Kurven korrekt.
- Welche zwei wichtigen Werkstoffeigenschaften lassen sich aus diesem Diagramm entnehmen?
- Zeichnen Sie in das Diagramm ein, wo und wie man diese Eigenschaften ablesen kann.

Aufgabe 4

- Was versteht man unter *amorpher Atomanordnung* bei Werkstoffen?
- Wie nennt man ganz allgemein Werkstoffe mit amorpher Atomanordnung auch noch, insbesondere in wissenschaftlichen Kreisen?
- Bei welchen drei Werkstoffgruppen liegt eine amorphe Atomanordnung vor?
- Wie erreicht man, dass bei diesen Werkstoffen die Atomanordnung amorph ist (wie stellt man sie her)?
- Und was ist das Gegenteil der amorphen Atomanordnung?



Die Kristalle, ihre Baufehler, und was diese in der Praxis so anrichten

Bei den meisten Werkstoffen in der Praxis, insbesondere bei den Metallen und Keramiken, ordnen sich die Atome schön regelmäßig an. Sie bilden dann ein *Kristallgitter*, das je nach Werkstoff recht unterschiedlich sein kann: eher locker gepackt oder schön dicht, eher einfach aufgebaut oder ziemlich kompliziert. Und genauso unterschiedlich wie die Kristallgitter sind dann auch ihre Eigenschaften. Ein wichtiges Thema, rechnen Sie einige Aufgaben dazu. Dabei schulen Sie, so ganz nebenbei, das räumliche Vorstellungsvermögen, und das kann man eigentlich immer gebrauchen, nicht nur bei den Werkstoffen.

Aufgabe 5

- Unter welchen Bedingungen kommt ein »locker« gepacktes Kristallgitter zu Stande?
- Und unter welchen Bedingungen entsteht ein dicht gepacktes?

Aufgabe 6

- Welche drei *Kristallgitter* kommen bei den reinen Metallen am häufigsten vor?



KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 31

- b) Fertigen Sie von jedem dieser drei Gitter eine sinnvolle, realistische Skizze an. Strengen Sie sich ruhig ein wenig an dabei, die Lage der Atome soll aus den Skizzen klar ersichtlich sein. Damit es nicht gar zu wild wird, nehmen Sie zunächst das »Drahtmodell« für Ihre Skizzen. Dabei stellen Sie die Atome kleiner dar, als sie es dem Abstand zueinander nach eigentlich sein sollten. Und die Bindungen zwischen den Atomen zeichnen Sie als Linien, das sind die gedachten Drahtstücke. Wer sich traut, kann im zweiten Schritt auch das Kugelmodell für die Skizzen ausprobieren, da betrachtet man die Atome als starre, massive Kugeln, die sich an bestimmten Stellen berühren.
- c) An welchen Stellen berühren sich nun die Atome? Gehen Sie auch hier wieder von der Vorstellung starrer, massiver Kugeln aus.
- d) Nennen Sie zu jedem der drei Kristallgitter mindestens zwei Beispiele für Metalle, die das jeweilige Kristallgitter aufweisen.
- e) Wenn Sie möchten, basteln Sie sich diese drei wichtigen Kristallgitter aus Tischtennisbällen, die Sie mit Alleskleber verbinden. Erst dadurch bekommt man ein wirklich gutes Gefühl für die Anordnung der Atome, man kann die Gitter dann im wahrsten Sinne des Wortes »begreifen«.



Bei den nachfolgenden fünf Aufgaben ist es sinnvoll, wenn Sie sich die Atome als starre, massive Kugeln denken, die sich an bestimmten Stellen berühren. Natürlich ist das nicht in Wirklichkeit genau so, aber mit dieser einfachen Annahme kann man viele Erscheinungen näherungsweise deuten, und das hilft beim Verständnis.

Und noch etwas: Als *Elementarzelle* bezeichnet man (vereinfacht) den kleinsten Baustein eines Kristallgitters, aus dem man das ganze Kristallgitter durch einfaches Aneinanderreihen aufbauen kann. Bei kubischen Gittern ist sie das Innere desjenigen Würfels, der durch die Mittelpunkte der **Eckatome** gebildet wird.

Denken Sie eine Weile darüber nach, Sie brauchen diese Überlegungen für die nachfolgenden Übungsaufgaben. Ach was, noch besser ist, Sie üben das gleich.

Aufgabe 7

Zeichnen Sie die »echte« Elementarzelle des kubisch-raumzentrierten (krz) und des kubisch-flächenzentrierten (kfz) Kristallgitters, so gut Sie das hinbekommen.



Denken Sie sich die Gitter aus Holzkugeln aufgebaut. An den Berührungspunkten seien die Holzkugeln miteinander verleimt. Nun sägen Sie gedanklich von diesem Gittermodell außen all das weg, was nicht zur eigentlichen Elementarzelle gehört. Sie sägen also (mit einem sehr dünn gedachten Sägeblatt) entlang der Würfelseitenfläche genau durch die Mittelpunkte der Eckatome hindurch. Was übrig bleibt, ist ein Würfel, an dessen Ecken die Mittelpunkte der Eckatome sitzen.



32 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

Zugegeben, das ist schon recht knifflig, besonders beim kfz-Gitter. Auch ich musste mich bei der Lösung ganz schön anstrengen und bin ins Schwitzen geraten. Sinngemäß geht das übrigens bei allen anderen Kristallgittern und deren Elementarzellen.

Und jetzt gibt es was zum Rechnen. Fangen Sie mal mit Eisen an, dem am häufigsten verwendeten Metall.

Aufgabe 8

Wie groß ist der Durchmesser von Eisenatomen bei Raumtemperatur, wenn die Kantenlänge der Elementarzelle (die nennt man Gitterkonstante) bekannt ist?



Die Kantenlänge der Elementarzelle ist bei kubischen Gittern der **Abstand der Mittelpunkte der Eckatome**. Er lässt sich übrigens vergleichsweise einfach und recht präzise mit Röntgenstrahlen messen. Führen Sie Ihre Rechnung ganz allgemein mit Variablen durch: Nennen Sie die Kantenlänge der Elementarzelle a , und weil es Eisen ist, nehmen Sie noch den Index Fe für Eisen dazu, also a_{Fe} . Klingt gleich viel wissenschaftlicher. Und den Durchmesser der Eisenatome nennen Sie d_{Fe} .

Führen Sie Ihre Rechnung logisch Schritt für Schritt durch, nennen Sie jeden Gedankengang Ihrer Rechnung klar.

Welcher Wert ergibt sich für den Atomdurchmesser bei $a_{\text{Fe}} = 0,287 \text{ nm}$ ($1 \text{ nm} = 1 \text{ Nanometer} = 10^{-9} \text{ Meter} = 1 \text{ millionstel Millimeter} = \text{arg klein}$)?

Jetzt geht es ans Kupfer, ein wichtiges, schönes und fast schon edles Metall.

Aufgabe 9

Wie groß ist der Durchmesser d_{Cu} von Kupferatomen bei Raumtemperatur, wenn die Kantenlänge der Elementarzelle a_{Cu} bekannt ist? Rechnen Sie ähnlich wie bei der vorhergehenden Aufgabe, nutzen Sie die dortigen Anmerkungen.

Welcher Wert ergibt sich für den Atomdurchmesser bei $a_{\text{Cu}} = 0,361 \text{ nm}$?

Eine auf den ersten Blick kuriose, aber fürs Folgende wichtige Frage schließt sich an.

Aufgabe 10

Wie viele Atome befinden sich anteilig in einer Elementarzelle

- des krz-Gitters und
- des kfz-Gitters?





KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 33



Bevor Sie wie ein Pfeil losschießen – und möglicherweise danebentreffen – ein Hinweis: Es geht um die »echte« Elementarzelle. Also bei kubischen Gittern um das **Innere** desjenigen Würfels, der ... Sie wissen jetzt, was ich meine. Auch hier bitte logisch jeden Gedankenschritt klar nennen.

Die nachfolgende Aufgabe scheint vorrangig nur mit räumlicher Geometrie zu tun zu haben, aber auch hier reichen die Auswirkungen bis in die Praxis.

Aufgabe 11

Wie groß ist die Packungsdichte

- des krz-Gitters und
- des kfz-Gitters?

Unter *Packungsdichte* versteht man den Anteil des Raumes in einem Gitter, den die Atome einnehmen, wenn man sich die Atome als starre massive Kugeln denkt. Man kann auch *Raumerfüllung* dazu sagen. Sie gibt an, wie viel Prozent eines Gitters aus massiven Kugeln besteht. Und der Rest, die Differenz zu 100 %, das ist dann »leerer Raum«.



Sie brauchen nicht einen Kristall mit zig Milliarden von Atomen zu nehmen, um diese Aufgabe zu meistern. Es reicht, wenn Sie die Elementarzelle heranziehen, die repräsentiert das ganze Gitter.

- ✓ Nennen Sie die Kantenlänge der Elementarzelle wieder allgemein a .
- ✓ Dann rechnen Sie das Volumen der gesamten Elementarzelle V_{EZ} aus.
- ✓ Anschließend bestimmen Sie das Volumen aller Atome V_{Atome} in der Elementarzelle.
- ✓ Und wenn Sie das Volumen aller Atome V_{Atome} durch das Volumen der Elementarzelle V_{EZ} dividieren, erhalten Sie die Raumerfüllung.

Sofern Sie alles richtig gemacht haben, müsste sich die Kantenlänge a herauskürzen. Damit auch alles richtig wissenschaftlich aussieht, nennen Sie die Packungsdichte η (kleines griechisches Eta). Natürlich kann man sie nennen, wie man möchte, aber diese Bezeichnung, dieses *Symbol*, wird häufig verwendet.

Und wofür sind die Kenntnisse zu den Kristallgittern überhaupt gut?

Aufgabe 12

Eigentlich wirkt sich die Art des Kristallgitters auf alle Eigenschaften der metallischen Werkstoffe aus. Welche zwei wichtigen Eigenschaften hängen aber besonders vom Kristallgitter ab? Können Sie dazu je ein Beispiel für die Auswirkung in der Praxis nennen?





34 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

Hier könnten sich noch zig weitere Aufgaben zu den Kristallgittern anschließen, aber die betreffen eher die eingefleischten Experten der Materialwissenschaften. Es gibt aber noch zwei Punkte, die mir wichtig erscheinen:

- ✓ die Änderung der Kristallart, die *Polymorphie*, und
- ✓ die *Kristallbaufehler*.

Beide Erscheinungen haben phantastische Auswirkungen in der Praxis. Legen Sie los mit der Polymorphie.

Aufgabe 13

- a) Was versteht man allgemein unter Polymorphie?
- b) Nennen Sie zwei oder drei Beispiele für metallische Elemente, die **keine** Polymorphie aufweisen (jedenfalls nicht unter halbwegs üblichen Bedingungen, wir lassen die Kirche im Dorf). Und jetzt bitte noch ein oder zwei Beispiele für metallische Elemente, die polymorph sind.
- c) Erläutern Sie die Polymorphie des Elementes Eisen anhand eines sinnvollen, beschrifteten Diagramms.
- d) Welche praktische Bedeutung hat die Polymorphie des Eisens?

Aufgabe 14

Wenn nun Eisen polymorphe Umwandlungen aufweist, was Sie sicherlich soeben richtig beschrieben haben, und die Kristallgitter des α - und γ -Eisens verschiedene Packungsdichten haben, was Sie sicherlich ebenfalls richtig ausgerechnet haben, was müsste denn dann bei der Kristallgitterumwandlung mit dem **Volumen und der Länge** eines Eisenstabs passieren? Für diejenigen unter Ihnen, die noch etwas mathematisch tüfteln wollen: Wie groß ist die prozentuale Volumenänderung (man nennt sie auch ganz korrekt relative Volumenänderung) bei der Umwandlung des α -Eisens in das γ -Eisen?

So, und jetzt geht es an die *Kristallbaufehler*, auch *Gitterfehler* genannt. Nichts ist perfekt, und auch den Kristallen passiert so allerhand. Und das Schöne an den Kristallbaufehlern ist, dass die Welt ohne sie viel ärmer wäre. Irgendwie erinnert mich das an uns Menschen, was wären wir ohne unsere Fehler ...

Aufgabe 15

Wie teilt man die Kristallbaufehler sinnvoll in verschiedene Arten ein? Versuchen Sie eine Gliederungsübersicht, nennen Sie die Kristallbaufehler.

Aufgabe 16

Nennen Sie drei verschiedene **null**dimensionale Kristallbaufehler mit Namen. Fertigen Sie von jedem der genannten Gitterfehler eine sinnvolle Skizze an, und nennen Sie ihre Bedeutung in der Werkstofftechnik.





KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 35

Aufgabe 17

- a) Nennen Sie einen **ein**dimensionalen Kristallbaufehler mit Namen.
- b) Welche zwei Untervarianten gibt es davon?
- c) Fertigen Sie von einer der Untervarianten eine sinnvolle Skizze an.
- d) Wie könnte man diesen Kristallbaufehler (theoretisch) aus einem perfekten Kristall erzeugen?
- e) Nennen Sie die Bedeutung dieses Kristallbaufehlers in der Werkstofftechnik.

Aufgabe 18

- a) Erläutern Sie den üblichsten Mechanismus der plastischen Verformung von Metallkristallen anhand von fünf Skizzen.
- b) Warum fällt den metallischen Werkstoffen gerade dieser Mechanismus leicht? Mit »leicht fällt« meine ich, dass man nur geringe mechanische Spannungen braucht, um ihn in Gang zu setzen, ihn zu aktivieren.

Aufgabe 19

Nennen Sie die drei wichtigsten **zwei**dimensionalen Kristallbaufehler. Fertigen Sie von jedem der genannten Gitterfehler eine sinnvolle Skizze an und nennen Sie die Bedeutung in der Werkstofftechnik.

Aufgabe 20

- a) Wie sind die meisten metallischen Werkstoffe des Alltags aufgebaut? Handelt es sich eher um ein- oder vielkristalline Werkstoffe? Sieht man ihnen das an?
- b) Bei welchen Beispielen aus dem Alltag kann man einzelne Kristalle mit dem bloßen Auge erkennen?
- c) In welchen Fällen sind Werkstücke aus einem einzigen Kristall, die sogenannten Einkristalle, sinnvoll?

So, das soll zunächst reichen. Wenn Sie diese Aufgaben ohne zu spicken gelöst haben, dann sind Sie schon ganz gut gewappnet. Gewappnet für eine Klausur, für den betrieblichen Alltag in der Firma und natürlich für einen abschließenden Test. Ich habe da einige konkrete, bewusst bunt gemischte Behauptungen vorbereitet, die entweder richtig sind oder nicht. Testen Sie sich, haken Sie bei den Behauptungen an, ob sie zutreffend sind oder nicht.





36 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

Richtig oder nicht richtig

Aufgabe 21

Behauptung	Richtig	Nicht richtig
a) Leerstellen liegen in allen metallischen Kristallen vor		
b) In Gläsern sind die Atome regellos angeordnet		
c) Versetzungen beeinflussen die mechanischen Eigenschaften eines Werkstoffs		
d) Ein Werkstück aus S235JR mit wenigen Korngrenzen ist (bei Raumtemperatur) fester als dasselbe Werkstück mit vielen Korngrenzen		
e) Die elastische Verformung von Kristallen läuft über die Bewegung von Versetzungen ab		
f) Korngrenzen zählen zu den eindimensionalen Kristallbaufehlern		
g) Die Bindungskräfte zwischen den Atomen eines Werkstoffs wirken sich auf den E-Modul des Werkstoffs aus		
h) Das Kristallgitter von Nickel weist anteilig 2 Atome pro Elementarzelle auf		
i) Zwillingskorngrenzen zählen zu den eindimensionalen Kristallbaufehlern		
j) Im Stahl S235JR sind die Atome bei Raumtemperatur amorph angeordnet		
k) Die plastische Verformung der metallischen Werkstoffe findet normalerweise über die Bewegung von Versetzungen im Kristallgitter statt		
l) Chrom weist bei Raumtemperatur ein kubisch-raumzentriertes Gitter auf		
m) Nickel weist bei Raumtemperatur ein kubisch-flächenzentriertes Gitter auf		
n) Das Kristallgitter von Chrom weist anteilig 2 Atome/Elementarzelle auf		
o) Leerstellen zählen zu den eindimensionalen Kristallbaufehlern		
p) Substitutionsatome sitzen statt eines regulären Atoms auf einem normalen Gitterplatz		
q) Aluminium weist polymorphe Umwandlungen auf		
r) Das Kristallgitter von Eisen bei Raumtemperatur weist anteilig 4 Atome/Elementarzelle auf		
s) Korngrenzen beeinflussen die mechanischen Eigenschaften eines Werkstoffs		
t) Das kfz-Kristallgitter weist anteilig 4 Atome/Elementarzelle auf		
u) Leerstellen erleichtern das Diffundieren von Atomen im Kristallgitter		
v) Eisen weist bei Raumtemperatur ein kubisch-raumzentriertes Gitter auf		
w) Zwischengitteratome sitzen statt eines regulären Atoms auf einem normalen Gitterplatz		

Antworten zu den Aufgaben in diesem Kapitel

Diejenigen Antworten, die Sie im Hauptbuch »Werkstoffkunde und Werkstoffprüfung für Dummies« ausführlich erklärt finden, halte ich hier eher kurz.

Lösung zur Aufgabe 1

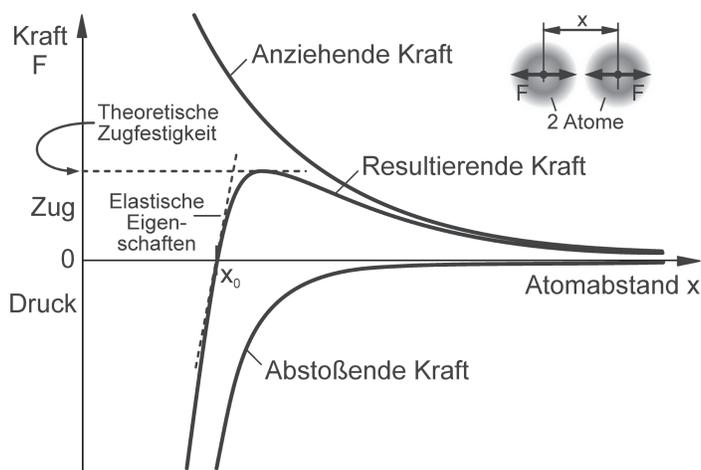
Atome bestehen aus einem schweren positiv geladenen Atomkern und leichten negativ geladenen Elektronen, die um den Atomkern »kreisen«. Die Elektronen bilden eher eine diffuse »Wolke«, so dass ein Atom äußerlich ein »weiches«, überwiegend leeres Gebilde darstellt. Dann gibt es noch die Quanteneffekte ...

Lösung zur Aufgabe 2

- Bindungen entstehen durch anziehende und abstoßende Kräfte zwischen den Atomen. Beide Kräfte wirken gleichzeitig; bei kleinen Atomabständen überwiegt die abstoßende, bei großen Abständen die anziehende Kraft, insgesamt kommt ein stabiler Gleichgewichtszustand zu Stande.
- Es gäbe nur Gase auf unserer Welt.

Lösung zur Aufgabe 3

- Das Diagramm:



- und c)** Die zwei Werkstoffeigenschaften sind die *theoretische Zugfestigkeit* und die *elastischen Eigenschaften* (Elastizitätsmodul).



38 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

Lösung zur Aufgabe 4

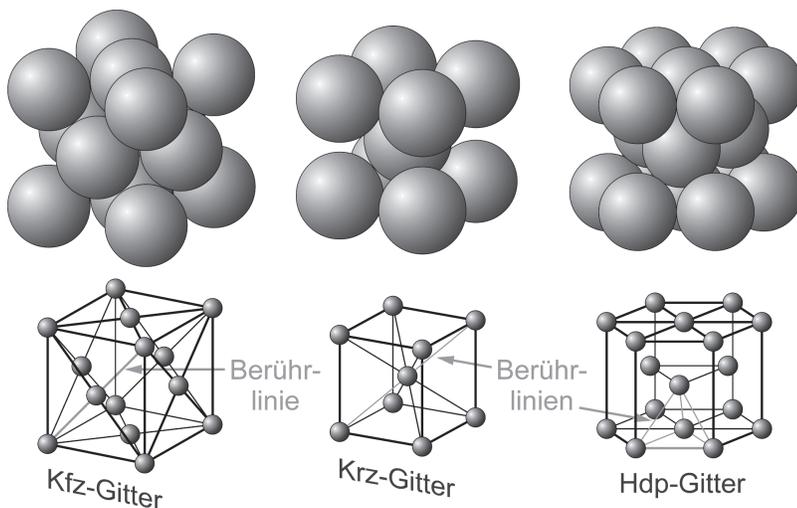
- Eine regellose Anordnung der Atome (wie die Kartoffeln im Sack).
- Das sind die *Gläser* (selbst dann, wenn man nicht durch sie hindurchsehen kann).
- Bei den *anorganischen Gläsern* (den »normalen«, wie Fensterglas), bei den *metallischen Gläsern* (durch die man übrigens nicht hindurchsehen kann) und den *amorphen Kunststoffen* (bei denen sind die Moleküle regellos angeordnet).
- Meistens durch ausreichend schnelle Abkühlung aus der Schmelze (»Einfrieren« der Atomanordnung, wie sie in der Schmelze vorliegt).
- Die regelmäßige Anordnung, die kristalline, da bilden die Atome ein regelmäßiges Kristallgitter (überwiegend jedenfalls, wenn man von den Kristallbaufehlern absieht).

Lösung zur Aufgabe 5

- Ein »locker« gepacktes Kristallgitter entsteht, wenn die Atome »eigenwillig« sind und Bindungen zu Nachbaratomen nur in bestimmten Richtungen eingehen, beispielsweise beim Kohlenstoff im Diamant. »Locker gepackt« bedeutet übrigens nicht, dass diese Kristallgitter zwangsläufig besonders schlecht oder schwach sind.
- Ein dicht gepacktes Kristallgitter entsteht bei denjenigen Atomen und Bindungsarten, bei denen die Richtung der Bindungen zu den Nachbaratomen nicht so wichtig ist, und die möglichst viele Bindungen eingehen wollen; dies liegt bei den meisten Metallen vor.

Lösung zur Aufgabe 6

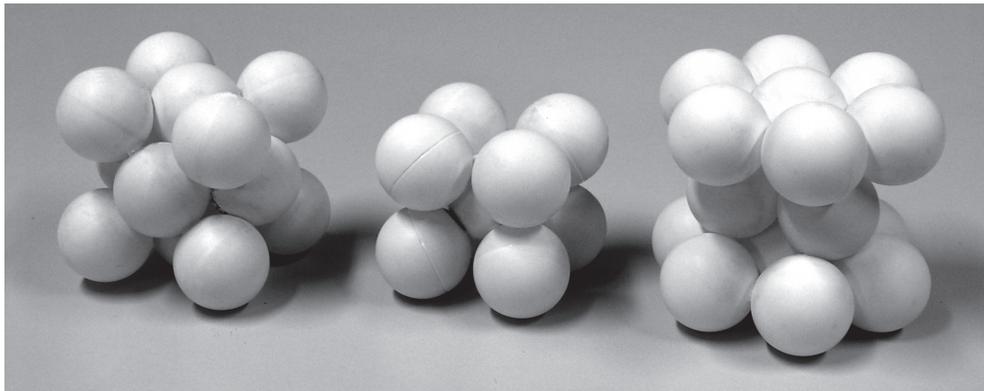
- Am häufigsten: kubisch-flächenzentriertes (kfz) Gitter, kubisch-raumzentriertes (krz) Gitter und hexagonal dichtest gepacktes (hdp) Gitter.
- Das sind die »Skizzen« der Kristallgitter:





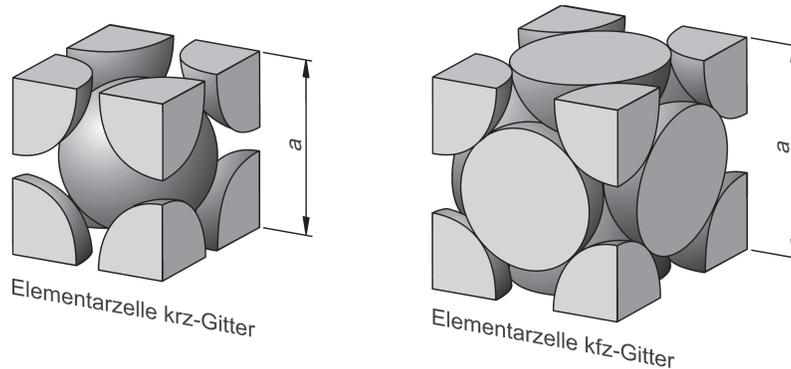
KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 39

- c) Beim kfz-Gitter berühren sich die Atome entlang der **Flächendiagonalen** der Elementarzelle (und in noch anderen Richtungen), beim krz-Gitter entlang der **Raumdiagonalen**. 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:



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





40 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

können Sie logisch nach dem Satz des Pythagoras berechnen oder aus einer Formelsammlung entnehmen, sie beträgt $\sqrt{3} \cdot a_{\text{Fe}}$. 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 $2d_{\text{Fe}}$).
- ✓ Und jetzt die **allgemeine Lösung**. Mathematisch lautet die zweite und dritte Überlegung:

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

Nach d_{Fe} aufgelöst erhalten Sie: $d_{\text{Fe}} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_{\text{Fe}}$.

- ✓ **Ganz konkret** ergibt sich: $d_{\text{Fe}} = \frac{\sqrt{3}}{2} 0,287 \text{ nm} = 0,249 \text{ nm}$.

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

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 gibt, 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.





KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 41

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:

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

- ✓ 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:

$$d = \frac{\sqrt{3}}{2}a \quad (2)$$

- ✓ 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:

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

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

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

- ✓ 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 %.





42 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

b) Kfz-Gitter

- ✓ Das **Volumen der Elementarzelle** ist wieder

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

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

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

- ✓ 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):

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

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

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

- ✓ 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.

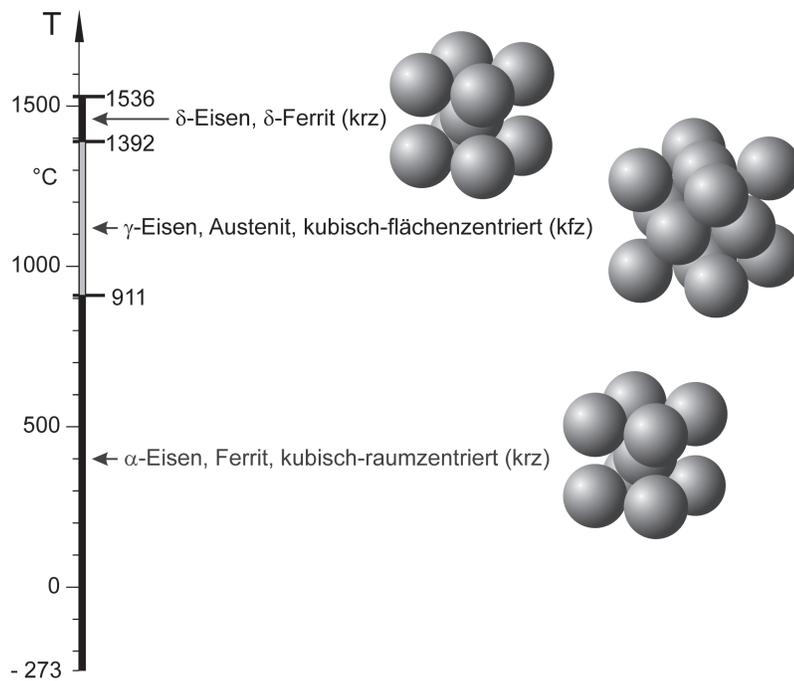
Lösung zur Aufgabe 13

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



KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 43

- b) Keine Polymorphie haben Aluminium, Kupfer, Chrom. Polymorph sind Eisen und Titan.
- c) Das (hoffentlich sinnvolle) Diagramm:



- 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:

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



44 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

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

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

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

$$V_{\text{kfz}} = \frac{V_{\text{Atome}}}{\eta_{\text{kfz}}} \quad (2)$$

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

$$V_{\text{krz}} = \frac{V_{\text{Atome}}}{\eta_{\text{krz}}} \quad (3)$$

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

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

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:

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

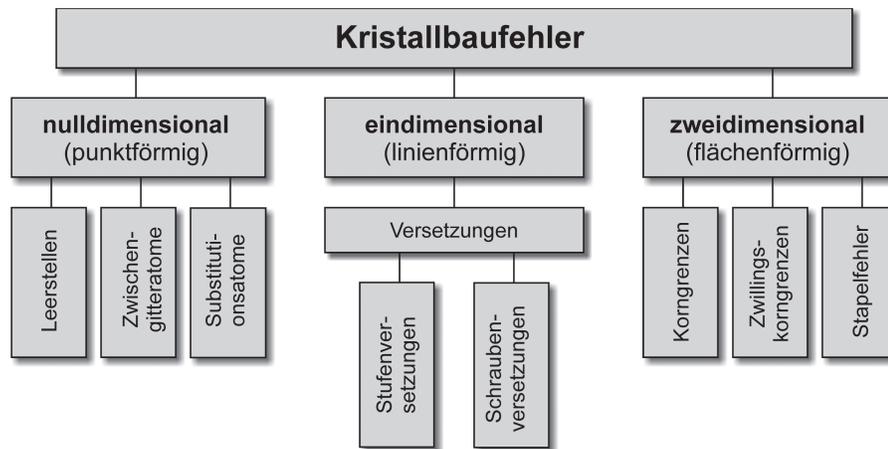
In Worten: Die relative Volumenänderung ist -0,0814. Oder prozentual ausgedrückt: Das Volumen schrumpft um 8,14 %. Tatsächlich misst man in Experimenten viel weniger Volumenschrumpfung; das ist ein Hinweis darauf, dass die Atome in Wirklichkeit eben doch keine starren, massiven Kugeln sind.

Lösung zur Aufgabe 15

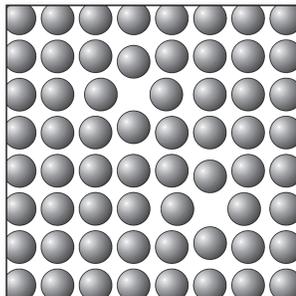
Man teilt sie ein in die *nulldimensionalen (punktförmigen)*, die *eindimensionalen (linienförmigen)* und die *zweidimensionalen (flächenhaften) Kristallbaufehler*:



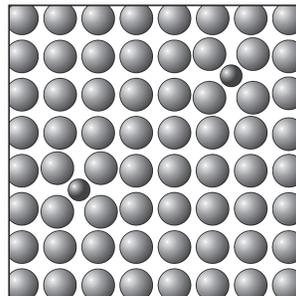
KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 45

**Lösung zur Aufgabe 16**

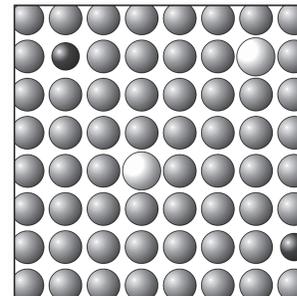
Das sind die *Leerstellen*, *Zwischengitteratome* und *Substitutionsatome*:



L erstell n



Zwischengitteratome



Substitutionsatome

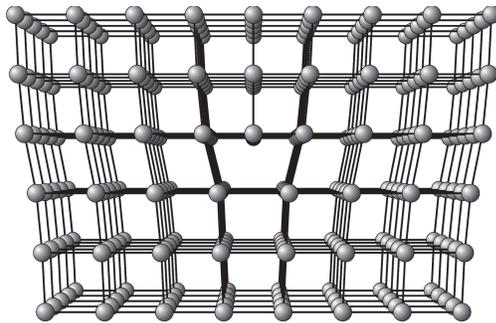
Die Leerstellen ermöglichen die Diffusion; die Zwischengitter- und die Substitutionsatome treten bei Legierungen auf.

Lösung zur Aufgabe 17

- Das ist die *Versetzung*.
- Stufen- und Schraubenversetzung* sind die beiden Varianten.
- Wählen Sie die Stufenversetzung, die lässt sich leichter zeichnen, und ganz so umfangreich wie in der nachfolgenden Abbildung muss Ihre Skizze nicht aussehen.



46 TEIL I Ausgewählte Grundlagen für ein solides Fundament

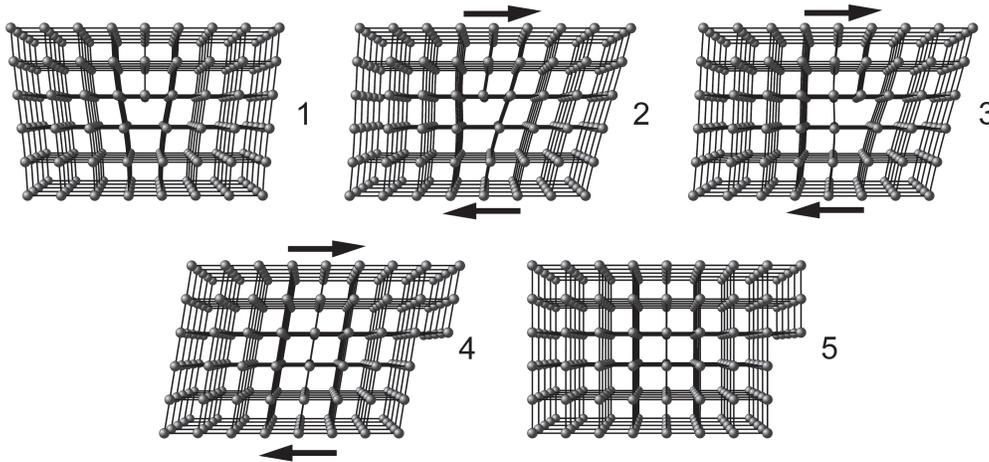


Stufenversetzung

- 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 nachfolgend 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 bei einem Bündel von Stäben jeden einzeln durchbrechen dürfen und nicht das ganze Bündel auf einmal.

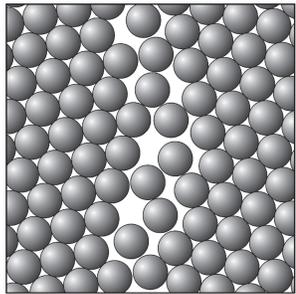




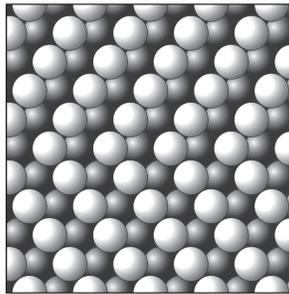
KAPITEL 1 Aufgaben rund um Atome, Bindungen und Kristalle 47

Lösung zur Aufgabe 19

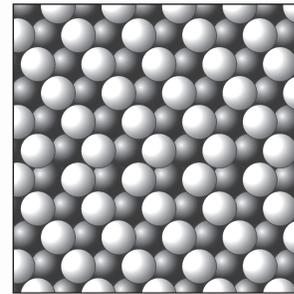
Es sind die *Korngrenzen*, *Zwillingskorngrenzen* und *Stapelfehler*:



Korngrenze



Zwillingskorngrenze



Stapelfehler

Die eigenen Handzeichnungen dürfen übrigens ruhig etwas vereinfacht sein. Die Hauptbedeutung liegt in der Beeinflussung der mechanischen Eigenschaften. Bei niedrigen Temperaturen (relativ zum Schmelzpunkt) wirken sich die zweidimensionalen Kristallbaufehler meist günstig aus, bei höheren Temperaturen eher ungünstig.

Lösung zur Aufgabe 20

- 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.
- Bei vielkristallinen Solarzellen und feuerverzinkten Teilen im Freien.
- 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.				✓	✓	✓		✓	✓	✓					✓		✓	✓					✓



