1

Die interessanten Dimensionen in Werkstoffen sind unvorstellbar klein. Typische Abstände von Atomen in Metallen liegen zwischen 0.1-0.3 nm. Die Atome ordnen sich zu kleineren Kristalliten (Körnern) an. Diese winzigen Kristalle sind in der Regel zwischen 1 und 50 μ m klein, vom bloßen Auge nicht erkennbar und wachsen an den Korngrenzen zusammen. Die Gesamtheit all dieser winzigen Kristallite (sowie unerwünschter Verunreinigungen und Poren) ergibt das Gefüge eines Metalls, welches sich unter dem Elektronenmikroskop wie ein faszinierendes Kunstwerk offenbart (Abb. 1.1).

Metalle bilden die wichtigste Klasse der Konstruktionswerkstoffe. Ihre praktischen Einsatzmöglichkeiten sind sehr vielseitig. Unter den metallischen Konstruktionswerkstoffen besitzen der feste Stahl und das leichte Aluminium die größte Bedeutung. Das teure Titan bietet einen guten Kompromiss zwischen hoher Festigkeit und relativ geringem Gewicht, bei guter Korrosionsbeständigkeit und Biokompatibilität. Teure Nickelbasislegierungen sind auch bei hohen Temperaturen von ca. 1000 °C fest und korrosionsbeständig. Noch teurere Refraktärmetalle wie Wolfram, Molybdän oder Tantal erfüllen ihren Dienst sogar bei deutlich höheren Temperaturen. Kupfer und die Edelmetalle Gold, Silber und Platin sind für ihre gute elektrische Leitfähigkeit und Korrosionsbeständigkeit bekannt. Darüber hinaus werden sie von den Kunden der Uhren- und Schmuckindustrie auch für ihr dekoratives Aussehen geschätzt.

Metalle sollten bei ihrer Herstellung möglichst gut formbar sein. Im späteren Einsatz als Konstruktionswerkstoff hingegen wird häufig eine möglichst hohe Festigkeit gefordert.



Abb. 1.1 Winzige Kristallite in einer gebrochenen Schraube, beobachtet unter einem Rasterelektronenmikroskop.

1

Grundlagen der Konstruktionswerkstoffe für Studium und Praxis, 1. Auflage. Janko Auerswald und Pius Portmann. © 2023 WILEY-VCH GmbH. Published 2023 by WILEY-VCH GmbH.

Metalle sollten darüber hinaus auch noch zäh sein, d. h. nicht unerwartet versagen, wie die ebenfalls festen, aber spröden Keramiken. Die hohe Kunst der Metallurgie besteht darin, diese widersprüchlichen Anforderungen zu erfüllen.

Anders als die zerbrechlichen Keramiken und Gläser mit ihrer Ionenbindung oder die ebenfalls spröden Halbleiter mit ihren gerichteten kovalenten Atombindungen können sich Metalle nicht nur elastisch, sondern auch plastisch verformen. Ursache dafür ist vor allem die Metallbindung, in der ein "Elektronengas" von freibeweglichen Valenzelektronen das Gitter der dicht gepackten Atomrümpfe zusammenhält und zugleich für die gute elektrische und thermische Leitfähigkeit sorgt. Diese Metallbindung sowie die hohe Packungsdichte ermöglichen eine plastische Verformung durch das Gleiten von Versetzungen auf dicht gepackten Kristallebenen.

Das Kap. 1 ist den wichtigsten Grundlagen der *Metallkunde* gewidmet. Die technisch relevantesten *Kristallstrukturen* und *Kristallbaudefekte* von Metallen werden vorgestellt. Manche Metalle wie Eisen sind *polymorph*, d. h., sie können verschiedene Kristallstrukturen annehmen. Der Begriff der *Tropie* wird eingeführt. Er beschreibt die Richtungsabhängigkeit der Eigenschaften. Kristallstruktur, Gitterdefekte und Tropie haben einen starken Einfluss auf das *elastische und plastische Verformungsverhalten* der Metalle. Um die Festigkeit von Metallen zu erhöhen, werden den *Versetzungen*, die für die plastische Verformung verantwortlich sind, gezielt Kristallbaudefekte wie Fremdatome, andere Versetzungen, Korngrenzen oder Ausscheidungen in den Weg gestellt. Man spricht in diesem Zusammenhang von *Verfestigungsmechanismen*.

1.1 Wichtige Kristallstrukturen von Metallen

Metalle besitzen relativ einfache, dicht gepackte Kristallstrukturen, die durch Elementarzellen dargestellt werden. Eine Elementarzelle ist eine kleine geometrische Einheit, die den gesamten Kristall komplett beschreibt. Die meisten Metalle kristallisieren in einer der drei Gitterstrukturen, deren Elementarzellen in Abb. 1.2 gezeigt werden. Es handelt sich um die kubisch-flächenzentrierte (kfz), kubisch-raumzentrierte (krz) und hexagonal dichteste Packung (hdp) der Metallatome.

In der kubisch-flächenzentrierten Elementarzelle (kfz) sind die Ecken und Flächenmitten eines Würfels mit Atomen besetzt. In der kubisch-raumzentrierten Elementarzelle (krz) sitzen die Atome an den Ecken und im Zentrum des Würfels. In der hexagonal dichtesten Packung (hdp) liegen die dichtest gepackten Ebenen von Atomen in sechsfacher Symmetrie (Sechsecke mit einem siebten Atom in der Mitte) in alternierender Anordnung übereinander.

Die guten metallischen Leiter Gold, Silber, Kupfer, Platin und Aluminium sowie das austenitische Gamma-(γ -)Eisen liegen in der kubisch-flächenzentrierten (kfz) Struktur vor. Das Alpha-(α -)Eisen sowie die hochschmelzenden Refraktärmetalle Wolfram, Molybdän, Tantal, Niob oder Chrom kristallisieren in der kubisch-raumzentrierten (krz) Struktur. Magnesium, Zink, Titan oder Cobalt bilden eine hexagonal dichteste Packung (hdp). Die Kristallstruktur und die darin enthaltenen Gitterdefekte beeinflussen die Eigenschaften von Metallen maßgeblich.

Die meisten metallischen Werkstoffe sind polykristallin. Sie bestehen aus unzähligen winzigen Kristalliten mit typischen Kristall- bzw. Korngrößen zwischen 10^0 und $10^2 \mu$ m.

1.1 Wichtige Kristallstrukturen von Metallen 3



Abb. 1.2 Typische Gitterstrukturen von Metallen: (a) kubisch-flächenzentrierte Elementarzelle (kfz), (b) kubisch-raumzentrierte Elementarzelle (krz), (c) Elementarzelle der hexagonal-dichtesten Packung (hdp).

Doch selbst bei dieser Winzigkeit müsste man, um auch nur eines dieser unzähligen kleinen Körner von ca. 10 µm · 10 µm · 10 µm als schematisches Bild darzustellen, einen Kristall mit wesentlich mehr Atomen zeichnen, als Menschen auf unserem Planeten leben.

Das ist nicht praktikabel. Daher bedient man sich des Modells der Elementarzelle als kleiner geometrischer Einheit, die eine Kristallstruktur und ihre Symmetrie vollständig beschreibt. Statt des winzigen Kristalls mit seinen Abermilliarden von Atomen zeichnet man die um Größenordnungen kleinere Elementarzelle.

Angenommen, die mittlere Korngröße von winzigen würfelförmigen Kristallen läge bei 10 µm. Angenommen, Länge, Höhe und Breite der ebenfalls würfelförmigen Elementarzelle, also der kleinen geometrischen Einheit, die den Kristall komplett beschreibt, läge bei 0.2 nm. Dann würde in einem solchen winzigen Kristall von $10 \cdot 10 \cdot 10 \,\mu\text{m}^3$ die unvorstellbare Anzahl von $1.25 \cdot 10^{14}$ geometrischen Elementarzellen vorliegen. Und dieser Kristall wäre noch nicht einmal vom bloßen Auge, sondern nur unter einem leistungsstarken Mikroskop erkennbar – umgeben von unzähligen weiteren kleinen Kristalliten (Körnern).

1.1.1 Miller'sche Indizes: Bezeichnung von Richtungen und Ebenen

Um die Kristallstrukturen beschreiben zu können, wird ein Koordinatensystem definiert, das die Elementarzelle aufspannt. Das Koordinatensystem besteht in der Regel aus drei Achsen (x, y, z). Die Längen a, b und c entsprechen den Kantenlängen der Elementarzelle in den Richtungen x, y und z. Zwischen den Achsen liegen die drei Winkel: α als Winkel zwischen den Achsen b und c, gemessen um die Achse a; β als Winkel zwischen a und c, gemessen um die Achse b; γ als Winkel zwischen a und b, gemessen um die Achse c. Es gibt in der Kristallographie sieben verschiedene Koordinatensysteme zur Beschreibung

von Kristallstrukturen:

- 1. Das *kubische* Kristallsystem mit a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ (Würfel als Elementarzelle).
- 2. Das *tetragonale* Kristallsystem mit $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ (Quader mit quadratischer Grundfläche als Elementarzelle).
- 3. Das *orthorhombische* Kristallsystem mit $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ (Quader mit rechteckiger Grundfläche als Elementarzelle).
- 4. Das *monokline* (einfach geneigte) Kristallsystem mit $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^{\circ}$ (rechteckige Grundfläche) und $\beta \neq 90^{\circ}$ (um die *b*-Achse geneigter "Quader" als Elementarzelle).
- 5. Das *trikline* (dreifach geneigte) Kristallsystem mit $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$.
- 6. Das *hexagonale* Kristallsystem, das durch drei Achsen beschrieben werden kann mit a = b ≠ c, α = β = 90°, γ = 120°. Dabei ist γ der Winkel zwischen a und b in der Grundebene mit sechsfacher Symmetrie. (Bemerkung: Manchmal wird für das hexagonale System auch die überbestimmte Vierfachindizierung mit vier Koordinatenachsen verwendet. Dann liegen in der Grundebene mit sechsfacher Symmetrie drei gleich lange Achsen mit Innenwinkeln von jeweils 120°.)
- Das *trigonale* (rhomboedrische) Kristallsystem mit a = b = c, α = β = γ ≠ 90°. (Bemerkungen: Die Elementarzelle ist ein Rhomboeder, der von sechs gleichseitigen Parallelogrammen bzw. Rauten begrenzt wird. Das trigonale ist mit dem hexagonalen Kristallsystem verwandt und kann wie dieses statt mit drei mit vier Miller'schen Indizes beschrieben werden.)

In jedem dieser Kristallsysteme gibt es weitere Unterklassen. Für *Metalle* sind vor allem das *kubische* und das *hexagonale* Kristallsystem interessant, seltener auch das *tetragonale* (z. B. für die tetragonal-innenzentrierte Martensitstruktur von gehärtetem Stahl).

Mit Hilfe dieser Koordinatensysteme lassen sich Richtungen und Ebenen eindeutig anhand der so genannten *Miller'schen Indizes* beschreiben. *Richtungen* schreibt man dabei in [*eckige*] Klammern. Sind bestimmte Richtungen aus Symmetriegründen kristallographisch gleichwertig, z. B. alle Würfelkanten in kubischen Systemen, so kann man alle diese Richtungen vom gleichen Typ in (spitzen) Klammern zusammenfassen. Die Miller'schen Indizes von *Ebenen* schreibt man in (*runde*) Klammern. Sind bestimmte Ebenen aus Symmetriegründen kristallographisch gleichwertig, z. B. Deckflächen eines Würfels in kubischen Systemen, so kann man alle diese Ebenen vom gleichen Typ in {*geschweiften*} Klammern zusammenfassen. Ein überstrichener Miller'scher Index wie z. B. Ī bedeutet -1.

Miller'sche Indizes für Richtungen im kubischen Kristallsystem: Im kubischen Kristallsystem, zu dem die kubisch-raumzentrierten (krz) und kubisch-flächenzentrierten (kfz) Metallstrukturen oder die Diamantstruktur gehören, basieren die Miller'schen Indizes für alle Richtungen und Ebenen auf einem kartesischen Koordinatensystem. Die Richtungen [xyz] ergeben sich aus der vektoriellen Zusammensetzung der kubischen Koordinaten (Abb. 1.3).

Die Richtungen [100], [010] und [001] entsprechen den Würfelkanten der Elementarzelle und spannen das kartesische Koordinatensystem auf. Sie können auch zu Richtungen des Typs (100) zusammengefasst werden, da sie aus Symmetriegründen kristallographisch gleichwertig sind. Die Richtungen vom Typ (111) sind die Raumdiagonalen und sind in krz Metallen die dichtest gepackten Richtungen. Die Richtungen vom Typ (110) sind die Flächendiagonalen und sind in kfz Metallen die dichtest gepackten Richtungen. In Halbleitern (Diamant- und Zinkblendestruktur) sind die (110)-Richtungen die Spaltrichtungen, in denen die Chips bevorzugt ausgesägt werden. Sie sind als Flats (flache Kanten) an run-

1.1 Wichtige Kristallstrukturen von Metallen 5



Abb. 1.3 Wichtige Richtungen im kubischen System. Beispiel: Die Richtung [111] ergibt sich als vektorielle Zusammensetzung aus jeweils einem Schritt in x-, y- und z-Richtung.



Abb. 1.4 Wichtige Ebenen in kubischen Elementarzellen. Beispiel: Die Ebene (100) schneidet die x-Achse in 1, die y- und z-Achse im Unendlichen (∞ , d. h. die Ebenen verläuft parallel zur y- und z-Achse). Aus den Kehrwerten der Schnittpunkte mit den Achsen, d. h. 1/1 für x, $1/\infty$ für y und $1/\infty$ für z. ergeben sich die Miller'schen Indizes dieser Ebene zu (100).

den Wafern erkennbar. Die Richtungen vom Typ (112) spielen in kfz Metallen und in der Formgedächtnislegierung Nitinol (NiTi) eine wichtige Rolle bei der Entstehung von Stapelfehlern und Zwillingsfehlern.

Die Miller'schen Indizes von Ebenen in kubischen Kristallsystemen ergeben sich indirekt aus den Schnittpunkten der Ebenen mit den Koordinatenachsen. Allerdings erscheinen in den Miller'schen Indizes für Ebenen (xyz) die Kehrwerte der Schnittpunkte mit den Achsen. Sie entsprechen dem Normalenvektor der Ebene. Verläuft eine betrachtete Ebene durch den Koordinatenursprung, so wird sie um einen Schritt in x, y, oder z aus dem Koordinatenursprung heraus verschoben, um ihre Miller'schen Indizes bestimmen zu können. Die Ebenen vom Typ {100} sind die Würfelflächen. Die Ebenen vom Typ {111} sind die dichtest gepackten Ebenen und damit die Gleitebenen für Versetzungen im kfz System. Die Ebenen vom Typ {110}, {112} und {123} sind Gleitebenen im krz System (Abb. 1.4).



Abb. 1.5 Wichtige Richtungen (blau) und Ebenen (rot) im hdp System. Das Koordinatensystem ist hier nicht kartesisch. Die rot markierten Ebenen sind dichtest gepackt, parallel und kristallographisch identisch.

Miller'sche Indizes im hexagonalen Kristallsystem: In der hexagonal dichtesten Packung von Metallen, die zu den hexagonalen Kristallstrukturen gehört, gibt es kein kartesisches Koordinatensystem. Die Grundebene ist die (001)-Ebene, die am dichtesten gepackt ist. In ihr liegen die dichtest gepackten Richtungen [100], [010] und [110]. Bei dreifacher Indizierung bilden die Richtungen [100], [010] und [001] das Referenzkoordinatensystem (Abb. 1.5).

(Bemerkung: Bei der ebenfalls gebräuchlichen vierfachen Indizierung wird die Grundebene von drei Koordinatenachsen aufgespannt, plus eine vierte Achse senkrecht dazu. In Bezug auf die dreifache Indizierung würden die vier Achsen in die Richtungen [100], [010], $[\bar{1}\bar{1}0]$ und [001] verlaufen. Die drei Achsen in der Grundebene werden dann mit [1000], [0100] und [0010] indiziert, während die senkrecht auf der Grundfläche stehende Koordinate die Indizierung [0001] erhält. In den folgenden Ausführungen wird weiterhin die dreifache Indizierung für die hdp Struktur verwendet.)

1.1.2 Packungsdichte und dicht gepackte Ebenen in Metallen

Sowohl die kfz als auch hdp Struktur besitzen die dichtest mögliche Packung von Atomen. Die dichtest gepackten Ebenen beider Strukturen, die in Abb. 1.6 rot markiert sind, sehen hinsichtlich der Anordnung und Packungsdichte der Atome identisch aus – dichter kann man Kugeln in einer Ebene nicht packen. Der wesentliche Unterschied zwischen ihnen ist die Stapelfolge der dichtest gepackten Ebenen übereinander. Die krz Struktur ist nicht so dicht gepackt wie die kfz und hdp Struktur (Abb. 1.6). Die Packungsdichte und auch die Anzahl der dicht gepackten Ebenen spielt eine wichtige Rolle bei der plastischen Verformung der Metalle.

Sowohl das kfz wie auch das hdp-Gitter besitzen beide die dichtest gepackte Anordnung von Atomen mit einer maximal möglichen Packungsdichte von 74 %. Sie unterscheiden sich jedoch in der Stapelfolge ihrer dichtest gepackten Ebenen. In der kfz Struktur entspricht die Stapelfolge der dichtest gepackten Ebenen dem Muster *ABC ABC*, d. h., die vierte Ebene liegt wieder über der ersten Ebene etc. Ist diese Stapelfolge gestört, spricht man von Stapelfehlern. In der hdp Struktur lautet die Stapelfolge der dichtest gepackten Ebenen *AB AB*, d. h., die dritte Ebene liegt wieder über der ersten Ebene ter ersten Ebene (Abb. 1.7).

Die *Packungsdichte* berechnet sich im Kugelmodell aus dem Quotienten des Volumens, das die Atome einer Elementarzelle (EZ) einnehmen, geteilt durch das Volumen der EZ. Die *kubisch-flächenzentrierte (kfz) EZ* enthält insgesamt vier Atome mit dem Radius *r*. Die acht Eckatome gehören jeweils nur zu einem Achtel, die sechs flächenzentrierten Atome nur zur Hälfte zur einer kfz Elementarzelle. Diese vier Atome weisen folgendes Volumen



Abb. 1.6 Die dichtest gepackten Ebenen der drei Kristallstrukturen (a) krz, (b) kfz und (c) hdp. Die dichteste Kugelpackung von Atomen gibt es im kfz und hdp Gitter.



Abb. 1.7 Stapelfolge der dichtest gepackten Ebenen im kfz Gitter (*ABC ABC*) und im hdp Gitter (*AB AB*). Durch den Unterschied in der Stapelfolge entstehen zwei verschiedene Kristallstrukturen.

auf:

$$V_{\text{Atome}} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 \,.$$

Entlang der Flächendiagonale stoßen die Atome, die einen Radius r besitzen, zusammen. Damit ergibt sich eine Länge der Flächendiagonalen von $4 \cdot r$ und gemäß dem Satz von Pythagoras eine Länge der Würfelkante a von:

$$a = \sqrt{\frac{(4r)^2}{2}} \,.$$

Das Volumen der kfz Elementarzelle (EZ) ergibt sich zu:

$$V_{\rm EZ} = a^3 = (\sqrt{8})^3 \cdot r^3$$
.

Damit lässt sich die Packungsdichte PD der kfz Elementarzelle berechnen:

$$PD_{kfz} = \frac{V_{Atome}}{V_{EZ}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{(\sqrt{8})^3 \cdot r^3} = \frac{2\pi}{3\sqrt{8}} = 74\%.$$

In der *hexagonal dichtesten Packung* sind die Atome ebenso dicht gepackt wie in der kfz Struktur ("dichter geht's nicht"), nur mit einer anderen Stapelfolge der dichtest gepackten Ebenen (*AB* statt *ABC ABC*). Damit beträgt die *Packungsdichte (PD) der hdp Struktur* genau wie in der kfz Struktur:

$$PD_{hdp} = PD_{kfz} = 74\%$$

Zu einer *kubisch-raumzentrierten Elementarzelle* gehören jeweils zwei Atome (acht Eckatome zu jeweils einem Achtel und das vollständige Zentralatom). Da die Atome auf der Raumdiagonalen zusammenstoßen, hat diese eine Länge von 4*r*. Wiederum gilt der Satz des Pythagoras, der nun als Hypotenuse die Raumdiagonale 4*r* und als Katheten die Flächendiagonale $\sqrt{2} \cdot a$ und die Würfelkante *a* beinhaltet:

$$(4r)^2 = 2a^2 + a^2$$

mit

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \, .$$

Die Packungsdichte (PD) der krz Elementarzelle ergibt sich zu:

$$PD_{krz} = \frac{V_{Atome}}{V_{EZ}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{\frac{4^3}{(\sqrt{3})^3} r^3} = \frac{\frac{8}{3} \pi}{\frac{64}{(3\sqrt{3})}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 68\%$$

Die krz Struktur ist also etwas weniger dicht gepackt als die kfz oder die hdp Struktur.

1.1.3 Polymorphie: Die Vielgestalt einiger Metalle

Metallische Werkstoffe wie Eisen (Stahl) und Titan, aber auch andere Werkstoffe wie Siliziumoxid, Zirkoniumoxid oder Kohlenstoff (Graphit, Diamant, Fullerene, Nanotubes, Graphen, amorpher Ruß) können je nach Temperatur und Herstellungsbedingungen verschiedene Strukturen einnehmen. Diese Polymorphie ("Vielgestalt") wird z. B. zum Härten von Stahl ausgenutzt. Reines Eisen ist von Raumtemperatur bis 911 °C kubischraumzentriert (krz Ferrit, α -Fe). Es nimmt zwischen 911 und 1392 °C eine kubisch-flächenzentrierte Struktur ein (kfz Austenit, γ -Fe) und wechselt oberhalb 1392 °C bis zur Schmelztemperatur (1536 °C) wieder in eine kubisch-raumzentrierte Struktur (krz δ -Fe). Abbildung 1.8 zeigt diese Polymorphie des Eisens.

Eisen-Kohlenstoff-Legierungen mit bis zu 2.1 % Kohlenstoff werden als Stähle bezeichnet. Wenn ein Stahl ca. 0.2 % Kohlenstoff (oder mehr) enthält und schnell abgeschreckt wird, kann sich der kfz Austenit in die sehr harte tetragonal-innenzentrierte Phase Martensit umwandeln (Abb. 1.9). Martensit ist metastabil. Beim Anlassen oberhalb 350 °C wandelt er sich in Ferrit und Zementit (chemische Verbindung Fe₃C) um. Ebenfalls metastabil ist das amorphe Eisen, das viele Fremdatome enthält. Als dünnes Band wird es sehr schnell abgeschreckt, so dass es beim Erstarren zu wenig Zeit hat zu kristallisieren.

Ein weiteres polymorphes Metall ist das Titan. Reines Titan liegt bis 882 °C in der hexagonal dichtest gepackten Kristallstruktur vor (α -Titan, hdp) und bei höheren Temperaturen in der kubisch-raumzentrierten Struktur (β -Titan, krz).



Abb. 1.8 Polymorphie des Eisens. (unten) Reines Eisen besitzt von Raumtemperatur bis 911 °C eine kubisch-raumzentrierte Kristallstruktur (krz α -Eisen, Ferrit). (Mitte) Zwischen 911 und 1392 °C liegt der kubisch-flächenzentrierte Austenit vor (kfz γ -Eisen). (oben) Zwischen 1392 °C und der Schmelztemperatur von 1536 °C existiert das krz δ -Eisen (Delta-Ferrit).



Abb. 1.9 Wird austenitisches Eisen mit mindestens 0.2 % oder mehr Kohlenstoff im Mischkristall sehr schnell in Wasser abgekühlt (abgeschreckt), so kristallisiert der kfz Austenit nicht in einem langsamen Diffusionsprozess zu krz Ferrit. In einem schnellen Umklappprozess entsteht Martensit mit seiner tetragonal-innenzentrierten Elementarzelle: (a) Eisenatome rot markiert, mögliche Zwischengitterplätze für Kohlenstoff grau. (b) Unter dem Mikroskop ist der extrem harte Martensit an seinem feinen nadelförmigen Gefüge erkennbar.

1.2 Kristallbaudefekte in realen Metallstrukturen

In der Realität haben alle Werkstoffe Defekte im Aufbau von Struktur und Gefüge. Diese beeinflussen die Eigenschaften erheblich, z. B. die elektrische Leitfähigkeit oder das Verformungsverhalten.

Man kann Kristallbau-Defekte gemäß ihrer geometrischen Dimension (D) klassifizieren:

- 0D: punktförmige Defekte, z. B. Leerstellen, Zwischengitter- und Austauschatome
- 1D: linienförmige Defekte, z. B. Versetzungen

- 2D: flächenförmige Defekte, z. B. Korngrenzen oder Phasengrenzen
- 3D: volumenartige Defekte, z. B. Ausscheidungen (zweite Kristallsorte oder Phase)

Die Kristallbaudefekte erhöhen die Festigkeit von Metallen (siehe auch Verfestigungsmechanismen, Abschn. 1.6) und verringern die elektrische und thermische Leitfähigkeit.

1.2.1 0D: punktförmige Defekte

Fremdatome oder Leerstellen sind punktförmige Gitterdefekte (Abb. 1.10). Typische Beispiele, wo Fremdatome gezielt eingebracht werden, sind metallische Legierungen mir Mischkristallhärtung, elektrische Widerstände oder dotierte Halbleiter.

Leerstellen stehen im thermodynamischen Gleichgewicht. Ihre Konzentration ergibt sich aus der Arrhenius-Beziehung

$$N_{\rm v}(T) = N_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{\rm B}}{kT}\right),$$

wobei:

- $N_{\rm v}(T)$ Leerstellenkonzentration bei Temperatur T,
- N₀ Leerstellenkonzentration bei Raumtemperatur,
- *E*_B Bildungsenergie für Leerstellen,

k Boltzmann-Konstante.

Die Leerstellenkonzentration beträgt bei Raumtemperatur etwa 10^{-12} (d. h. eine Leerstelle auf $10\,000 \cdot 10\,000 \cdot 10\,000$ Atome), nahe bei der Schmelztemperatur ca. 10^{-4} (d. h. eine Leerstelle auf ca. $22 \cdot 22 \cdot 22$ Atome). Mit Hilfe von Leerstellen können Atome ihre Plätze wechseln und werden "beweglich". Aus dieser Tatsache heraus ergibt sich die Bedeutung der Leerstellen für den Stofftransport im festen Zustand (Diffusion).

Mischkristall: Fremdatome in einem Kristall werden auf regulären Gitterplätzen eingebaut (Substitutionsatome in Austauschmischkristallen) oder, wenn sie genügend klein sind



Abb. 1.10 Beispiele für Punktdefekte: Leerstelle, Zwischengitteratom, interstitielles Fremdatom auf Zwischengitterplatz (Einlagerungsfremdatom), Substitutionsfremdatom auf Gitterplatz (Austauschfremdatom). Die Kombination von Leerstelle und Zwischengitteratom wird Frenkel-Defekt genannt und spielt für Diffusionsprozesse eine Rolle. Statistisch unregelmäßig im Kristall verteilte Einlagerungs- oder Austauschfremdatome führen zu Mischkristallen.

(z. B. Kohlenstoffatome in Eisen), auf Zwischengitterplätzen eingelagert (interstitielle Atome in Einlagerungsmischkristallen). Werden Fremdatome im Sinne einer Legierungsbildung in einen Kristall eingebaut, so spricht man von einer festen Lösung bzw. einem Mischkristall.

In der Umgebung von Punktdefekten ist das Gitter elastisch verzerrt. Fremdatome in Mischkristallen metallischer Legierungen führen zum Anstieg der Festigkeit und des elektrischen Widerstandes.

1.2.2 1D: Versetzungen

Versetzungen entstehen bereits bei der Kristallisation. Sie werden aber auch in großer Zahl bei der plastischen Verformung von Metallen erzeugt. In Metallen sind Versetzungen für die plastische Verformung verantwortlich. (Bei hohen Temperaturen tragen auch Leerstellen und Korngrenzen durch Diffusionsprozesse zur plastischen Verformung bei.)

Stufenversetzung: Dieser Liniendefekt soll zunächst am Beispiel einer Stufenversetzung erläutert werden. Eine Stufenversetzung kann man sich als eine eingeschobene Gitterebene vorstellen, die in einer bestimmten Tiefe mitten im Kristall endet. Die Versetzungslinie ist die Begrenzungslinie dieser eingeschobenen Ebene (Abb. 1.11). Um sie herum entsteht ein Verzerrungsfeld. Die eingeschobene Halbebene einer Stufenversetzung bewegt sich bei der plastischen Verformung schrittweise durch den Kristall (siehe auch Abb. 1.20 sowie Abb. 1.21), indem die Atome an der Versetzungslinie unter dem Einfluss der Schubspannung, die auf der Gleitebene wirkt, einen Schritt weiterspringen. Die Sprungrichtung der Atome (Burgers-Vektor) ist senkrecht zum Verlauf der Versetzungslinie.

An den Grenzflächen von teilkohärenten Ausscheidungen liegen ebenfalls Stufenversetzungen vor, die so genannten Fehlpassungsversetzungen (siehe auch Abb. 1.14b).

Schraubenversetzung: Abbildung 1.12 zeigt die schematische Darstellung einer Schraubenversetzung. Anders als bei einer Stufenversetzung stimmen bei der plastischen Verformung Bewegungsrichtung der Versetzungslinie und Sprungrichtung der Atome an der Versetzungslinie (Burgers-Vektor) nicht überein. Sie stehen senkrecht aufeinander. Die Atome an der Versetzungslinie einer Schraubenversetzung springen bei der plastischen Verfor-



Abb. 1.11 Schematische Darstellung einer Stufenversetzung. Es handelt sich um eine eingeschobene Halbebene. Bei der plastischen Verformung in Metallen ist die Sprungrichtung der Atome (Burgers-Vektor *b*) senkrecht zum Verlauf der Versetzungslinie einer Stufenversetzung (siehe auch Abb. 1.20 und 1.21).



Abb. 1.12 Schematische Darstellung einer Schraubenversetzung. Die Sprungrichtung der Atome bei der plastischen Verformung (Burgers-Vektor *b*) ist parallel zur Versetzungslinie einer Schraubenversetzung (siehe auch Abb. 1.21).

mung unter dem Einfluss der Schubspannung, die auf die Gleitebene wirkt, einen Schritt in Richtung der Versetzungslinie.

Neben Versetzungssegmenten mit idealem Stufencharakter oder Schraubencharakter gibt es immer auch Segmente mit gemischtem Charakter, wo sich die Atome bei der plastischen Verformung in eine andere Richtung bewegen als senkrecht oder parallel zur Versetzungslinie, wenn diese über sie hinweggeht (siehe auch Abb. 1.21).

Die Schraubenversetzung spielt auch beim Ziehen nahezu perfekter Halbleitereinkristalle aus der Schmelze eine Rolle. Dazu wird der Keimkristall langsam aus der Schmelze gezogen und um die eigene Achse gedreht (siehe auch Abb. 1.15a). Die Atome aus der hochreinen Schmelze lagern sich bei der Kristallisation an die Schraubenversetzung wie an eine Wendeltreppe an.

1.2.3 2D: Korngrenzen und andere Flächendefekte

Die meisten technischen Werkstoffe sind polykristalline Werkstoffe, d. h., sie sind aus einer Vielzahl kleiner Kristalle, den so genannten Körnern, aufgebaut. Die Körner entstehen z. B. beim Erstarren einer Schmelze, indem die Kristallisation an vielen Orten gleichzeitig einsetzt (Abb. 1.13). An den Korngrenzen stoßen die aus der Schmelze wachsenden Körner zusammen. *Die meisten Werkstoffe in der Praxis sind polykristallin*. Sie bestehen aus unzähligen Kristallen, bei denen die Größe zwischen einigen Nanometern und einigen Zentimetern variieren kann. Diese kleinen Kristallite werden auch als Körner bezeichnet. Typische Korngrößen liegen zwischen 1–100 µm. Die schmalen Bereiche geringerer Ordnung zwischen den Körnern heißen Korngrenzen und sind ca. 1–100 nm breit.

Außer Korngrenzen gibt es noch andere Flächenfehler wie Zwillingsgrenzen oder Stapelfehler, die beide bevorzugt in hdp und kfz Strukturen auftreten. Von einem Stapelfehler spricht man, wenn z. B. in einem kfz Gitter der Zählrhythmus in der Schichtenfolge der dichtest gepackten Gitterebenen gestört ist: *ABC BC ABC* (intrinsischer Stapelfehler, eine Ebene *A* "fehlt") oder *ABC B ABC ABC* (extrinsischer Stapelfehler, eine Ebene *B* "zu viel") anstatt *ABC ABC ABC. Zwillingsbildung* basiert auf einer Spiegelebene in der Stapelfol-

1.2 Kristallbaudefekte in realen Metallstrukturen 13



Abb. 1.13 Entstehung von Körnern und Korngrenzen bei der Kristallisation aus der Schmelze (a) über Keimbildung (b) und Wachstum der Kristallite (c) bis zum schematischen polykristallinen Gefüge mit Körnern und Korngrenzen (d). Die kleinen Kristallite sind typischerweise ca. 1–100 µm groß und werden Körner genannt. Die Bereiche, wo sie nach dem abgeschlossenen Kristallwachstum zusammenstoßen, heißen Korngrenzen. Diese sind ca. 1–100 nm breit.

ge der dichtest gepackten Ebenen nach dem Muster *ABC ABCBA CBA*. Stapelfehler und Zwillingsbildung tragen neben dem Versetzungsgleiten ebenfalls zur plastischen Verformung bei. In Ni-Ti-Formgedächtnislegierungen (Nitinol) dominiert die Zwillingsbildung sogar aufgrund der geringen Stapelfehlerenergie bei der plastischen Verformung.

1.2.4 3D: Ausscheidungen

Zu den Ausscheidungen gehören z. B. Zementit in Stahl, γ' -Ausscheidungen in Superlegierungen oder Ausscheidungen in Cu-Be-Kontaktwerkstoffen. Oft treten Ausscheidungen an Zentren erhöhter Energie auf, z. B. den Korngrenzen. Ausscheidungen können aber auch als eigenständige Phase (neue Kristallsorte) innerhalb von kristallinen Körnern auftreten (z. B. Ni₃Al-Ausscheidungen mit einer eigenen kubischen L1₂-Struktur in kfz Nickelmischkristallkörnern von Superlegierungen). Diese Ausscheidungen behindern die Versetzungsbewegung bei der plastischen Verformung. Sie können aber von den Versetzungen geschnitten, umgangen oder überklettert werden, was bei Korngrenzen nicht der Fall ist.

Eine Phase ist ein in sich homogener Teil eines Werkstoffs bezüglich chemischer Zusammensetzung, Struktur und Eigenschaften. Es existieren ein- und mehrphasige Werkstoffe. Ausscheidungen gibt es logischerweise nur in mehrphasigen, heterogenen Werkstoffen. Die Phasen sind voneinander getrennt durch so genannte Phasengrenzen. Man unterscheidet kohärente, teilkohärente und inkohärente Phasengrenzen (Abb. 1.14). Die Kohärenz beschreibt den Grad der Übereinstimmung der Gitterparameter und Kristallorientierung.

Im Fall der kohärenten Phasengrenze ist die Passung zwischen den beiden Phasen sehr gut, bei der inkohärenten Phasengrenze sehr schlecht. Phasengrenzen sind von Bedeutung für die Aushärtung von Al-, Ti-, Ni- und Cu-Legierungen sowie höchstfester Stähle. Durch die Erzeugung von kohärenten Ausscheidungen einer zweiten Phase entstehen Kohärenzspannungsfelder, welche die Versetzungsbewegung durch weitreichende Gitterverzerrungen behindern. Dies führt zu einer starken Erhöhung der Festigkeit einer Legierung.





Abb. 1.14 Kohärenz von Ausscheidungen. (a) Kohärente Ausscheidung. Die Gitterebenen des Kristalls laufen in der Ausscheidung weiter. Das Gitter um die kohärente Ausscheidung herum ist durch den Größenunterschied der Atome weiträumig elastisch verspannt. Die Ausscheidung wirkt als großes Versetzungshindernis weiter in den Kristall hinein, als es ihre geringe Größe vermuten ließe. Dies führt zu einer hohen Festigkeit der Legierung. (b) Teilkohärente Ausscheidung. Die Gitterlinien laufen teilweise in der Ausscheidung weiter. Durch Fehlpassungsversetzungen an der Grenzfläche zur Ausscheidung kann sich der Kristall etwas entspannen. Der Festigkeitsanstieg ist weniger stark als bei kohärenten Ausscheidungen vergleichbarer Anzahl und Größe. (c) Inkohärente Ausscheidung. Die Gitterebenen laufen nicht in der Ausscheidung weiter. Das Gitter um die inkohärente Ausscheidung ist kaum verspannt und der Festigkeitsanstieg der Legierung relativ gering.

1.3 Tropie: Die Richtungsabhängigkeit der Eigenschaften

Der Begriff der Tropie beschreibt die Richtungsabhängigkeit der Eigenschaften von Werkstoffen. Die physikalischen Eigenschaften eines Gases, einer Flüssigkeit (auch Schmelzen) oder eines amorphen Festkörpers verhalten sich in allen Richtungen des Raumes gleich. Man bezeichnet diese Stoffe als isotrop (griech. *iso*, gleich). Zu den amorphen Werkstoffen gehören neben den klassischen Gläsern und amorphen Kunststoffen auch die metallischen Gläser, die vor allem als Funktionswerkstoffe im Bereich verlustarmer Transformatoren eingesetzt werden.

Die Eigenschaften amorpher Werkstoffe sind immer isotrop.

In Einkristallen liegt eine Richtungsabhängigkeit bzw. Anisotropie der Kristalleigenschaften vor. Turbinenschaufeln im heißesten Bereich von Flugzeug- und Gasturbinen sind anisotrop. Aber auch klassische Halbleiter wie Silizium (Abb. 1.15) oder Faserverbundwerkstoffe mit einer Vorzugsorientierung der Fasern zeigen ein richtungsabhängiges Verhalten der Eigenschaften.

Einkristalline Werkstoffe verhalten sich in der Regel anisotrop.

Der *E*-Modul als Maß für die Bindungskraft ist in den meisten kubischen Kristallstrukturen von Metallen wie Gold, Kupfer, α -Eisen oder Aluminium bzw. von Halbleitern wie Silizium oder Germanium in Richtung der Raumdiagonalen der kubischen Elementarzelle am größten (Abb. 1.16). Es gibt aber auch Ausnahmen wie das kubische Wolfram, dessen *E*-Modul sich nahezu isotrop verhält. Ursache ist der Tensor der elastischen Konstanten und der daraus resultierende *Anisotropiefaktor* für kubische Kristalle, der bei der elastischen Verformung kubischer Einkristalle genauer erläutert wird.



Abb. 1.15 (a) Siliziumeinkristall mit 300 mm Durchmesser für die Halbleiterindustrie. (b) Einkristalliner Siliziumwafer mit 100 mm Durchmesser für Halbleiter und MEMS. Der Wafer besitzt die kubische Diamantstruktur. Die Oberfläche ist eine {001}-Ebene (Würfelfläche). Die flachen Kanten rechts und links verlaufen jeweils parallel zu einer 〈110〉-Richtung (Flächendiagonale der kubischen Elementarzelle). Entlang dieser Richtungen kann Silizium am einfachsten gesägt werden (Spaltrichtungen). Foto: © Fa. Siltronic AG, Nachdruck mit freundlicher Genehmigung der Siltronic AG.



Abb. 1.16 (a) Typische Anisotropie des *E*-Moduls vieler kubischer Einkristalle. Eine große Pfeildicke symbolisiert einen großen *E*-Modul in der entsprechenden kristallographischen Richtung. In den meisten kubischen Metallen ist der *E*-Modul in den $\langle 111 \rangle$ -Richtungen der Raumdiagonalen am größten, in den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen der Würfelkanten am kleinsten. Es gibt einige wenige Ausnahmen wie Wolfram, das sich nahezu isotrop verhält. (b) Kubisch-flächenzentrierte Elementarzelle (Cu, Ag, Au, Pt, Ni, γ -Fe). (c) Kubisch-raumzentrierte Elementarzelle (α -Fe, Cr, Mo, W, Nb, Ta).

Ein polykristallines Gefüge ohne Vorzugsorientierung der Kristalle (ohne Textur) besteht aus vielen einzelnen anisotropen Körnern. Diese nehmen im Allgemeinen aber alle im Raum möglichen unterschiedliche Orientierungen ein. Daher gleichen sich die Unterschiede der Eigenschaften in verschiedenen Richtungen der einzelnen Kristalle statistisch wieder aus. Der Werkstoff verhält sich als Ganzes nach außen *quasiisotrop* (Abb. 1.17).

Polykristalline Gefüge mit Textur hingegen zeigen anisotrope Eigenschaften, da die Körner herstellungsbedingt eine bestimmte Vorzugsorientierung besitzen. Ein Beispiel ist die Goss-Textur in Elektroblechen für Transformatoren. In dieser Walztextur liegen die vielen kleinen Eisenkristallite mit ihren Würfelkanten vom Typ (100) parallel zur Walzrichtung. Dabei orientieren sich Ebenen vom Typ [110] parallel zur Blechoberfläche.

Polykristalline Werkstoffe ohne Textur verhalten sich quasiisotrop. Obwohl jedes Korn für sich eigentlich anisotrop ist, wirkt der Werkstoff durch den Ausgleich der Eigenschaften wegen der statistisch zufälligen Kornorientierung nach außen isotrop.



Abb. 1.17 (a) Quasiisotropes polykristallines Gefüge ohne Textur, schematische Skizze. (b) Anisotropes polykristallines Gefüge mit Textur, d. h. mit einer Vorzugsorientierung der Kristalle, schematische Skizze.

Polykristalline Werkstoffe mit Textur verhalten sich anisotrop. Mit Textur ist eine Vorzugsorientierung der Körner gemeint, so dass sich die Eigenschaften in verschiedenen Richtungen nicht mehr statistisch ausgleichen.

1.4 Linear-elastische Verformung

Bei der Verformung von Metallen werden zunächst die Bindungskräfte ("Federkräfte") zwischen den Atomen beansprucht. Nach Wegnahme der Kraft federn die Atome in ihre Ausgangslage zurück (reversible elastische Verformung). Der Elastizitätsmodul (*E*-Modul, in GPa) ist im linear-elastischen Bereich ein Maß für den Widerstand gegen diese elastische Verformung. Je höher der *E*-Modul, desto schwieriger ist die elastische Verformung (hohe Federkraft) und desto geringer der thermische Ausdehnungskoeffizient (Abb. 1.18).

Häufig folgt dem linear-elastischen Bereich bei zunehmender Kraft noch ein Bereich der nichtlinearen elastischen (aber ebenfalls reversiblen) Verformung, der bei Metallen schließlich in einen Bereich der plastischen, irreversiblen Verformung übergeht.

1.4.1 Linear-elastische Verformung isotroper Werkstoffe

Zieht eine Kraft einen Werkstoff durch elastische Verformung in die Länge, so dehnt er sich in Richtung der Zugkraft leicht aus. Senkrecht dazu hingegen verjüngt sich der Querschnitt durch die Querkontraktion. Die Ursache dieses Verhaltens liegt darin begründet, dass im Werkstoff die elastischen Bindungskräfte (Federkräfte) Tensorcharakter haben und in allen Raumrichtungen wirken. Ein einachsiger Spannungszustand führt über die mehrdimensionalen elastischen Eigenschaften im Werkstoff zu einem dreiachsigen Dehnungszustand. Dies soll am Beispiel isotroper und quasiisotroper Materialien wie polykristallinem Gold, Silber, Kupfer, Aluminium, Eisen (jeweils ohne Textur) oder amorphem Glas gezeigt werden.

Bei der linear-elastischen Verformung bewirkt eine Kraft sehr geringe reversible Längenänderungen in einem Metall. Wirkt eine Normalkraft F in z-Richtung senkrecht auf der Ausgangsfläche A_0 eines würfelförmigen Volumenelements (Abb. 1.19a), so ist σ als



Abb. 1.18 Atomares Energie-Abstand-Modell. Der Gleichgewichtsabstand wird mit zunehmender Temperatur größer (thermische Ausdehnung), wobei die Atome immer stärker um ihre jeweilige Gleichgewichtslage schwingen.

Quotient von F und A_0 die Normalspannung in z-Richtung, ε_1 die resultierende elastische Längsdehnung (Längenänderung $L_z - L_0$ in Richtung der Normalkraft F bezogen auf die Ausgangslänge L_0) und ε_q die elastische Querdehnung (Längenänderung $L_x - L_0$ bzw. $L_y - L_0$ senkrecht zur Normalkraft F bezogen auf die Ausgangslänge L_0). Wirkt eine Schubkraft F in y-Richtung in der Ausgangsfläche A_0 , eines würfelförmigen Volumenelements (Abb. 1.19b), so ist τ als Quotient von F und A_0 die Schubspannung, α der resultierende Scherwinkel und γ als Quotient der Längenänderung ΔL in y-Richtung bezogen auf die Ausgangslänge L_0 in z-Richtung bzw. als tan α die Scherung. Da die linear-elastischen Verformungen sehr klein sind, ist es zulässig, die Normalspannungen σ , Schubspannungen τ , Dehnungen ε und Scherungen γ auf die Ausgangsdimensionen des würfelförmigen Volumenelements (Fläche A_0 und Länge L_0) zu beziehen.



Abb. 1.19 Elastische Verformung isotroper Werkstoffe. (a) Definition der Normalspannung σ als Quotient der Kraft F bezogen auf die Ausgangsfläche A_0 . Die Normalspannung wirkt hier in z-Richtung senkrecht zum Ausgangsquerschnitt A_0 und wird daher auch als σ_{zz} oder σ_{33} bezeichnet. Die Normalspannung in z-Richtung bewirkt eine elastische Längsdehnung in z-Richtung (ε_1 bzw. ε_{zz} bzw. ε_{33}) und eine elastische Querkontraktion in x- und y-Richtung (ε_q bzw. ε_{xx} und ε_{yy} bzw. ε_{11} und ε_{22}). (b) Definition der Schubspannung τ als Quotient der Kraft F bezogen auf die Ausgangsfläche A_0 . Bei der hier gezeigten Schubspannung τ wirkt die Kraft F in der Ausgangsfläche A_0 mit einer Ebenennormalen in z-Richtung (ω_z -Ebene") in Richtung y. Die entsprechende Schubspannung heißt τ_{zy} oder τ_{32} . Die gezeigte Scherung $\gamma = \tan \alpha$ bezieht sich auf die Ausgangslänge L_0 in z-Richtung bei einer Längenänderung ΔL in y-Richtung. Sie wird daher mit γ_{zy} oder γ_{32} indiziert.

Für den Fall der Normalspannung (Abb. 1.19a, Kraft F wirkt senkrecht zur Ausgangsfläche A_0) gelten die folgenden Zusammenhänge:

$$\begin{split} \sigma &= \frac{F}{A_0} & (\text{Normalspannung in } z\text{-Richtung}), \\ \varepsilon_1 &= \frac{L_z - L_0}{L_0} & (\text{Längsdehnung in } z\text{-Richtung}), \\ \varepsilon_q &= \frac{L_y - L_0}{L_0} &= \frac{L_x - L_0}{L_0} & (\text{negative Querdehnungen in } x\text{- und } y\text{-Richtung}), \\ \nu &= -\frac{\varepsilon_q}{\varepsilon_1} & (\text{Querkontraktionszahl}), \\ E &= \frac{\sigma}{\varepsilon_1} & (E\text{-Modul}). \end{split}$$

Für den Fall der Schubspannung (Abb. 1.19b, Kraft F wirkt parallel zur Ausgangsfläche A_0) gelten die folgenden Zusammenhänge:

$$\tau = \frac{F}{A_0} \quad \text{(Schubspannung in z-Ebene in y-Richtung)},$$
$$\gamma = \frac{\Delta L}{L_0} \quad \text{(Scherung)},$$
$$G = \frac{\tau}{\gamma} \quad \text{(Schubmodul)}.$$

In isotropen Werkstoffen gibt es drei elastische Konstanten. Sind zwei der drei elastischen Konstanten isotroper Werkstoffe, z. B. der Elastizitätsmodul E und die Querkontraktionszahl ν , bekannt bzw. in einem Zugversuch ermittelt worden, so lässt sich die dritte, z. B. der Schubmodul G, aus den anderen beiden berechnen gemäß:

$$G = \frac{E}{2 \cdot (1 + \nu)}$$
 (Zusammenhang der isotropen elastischen Konstanten).

1.4.2 Vertiefung: linear-elastische Tensoren für isotrope Werkstoffe

Die Tensorschreibweise ermöglicht ein umfassenderes Verständnis der Zusammenhänge zwischen Spannung und elastischer Dehnung. Anhand der Abb. 1.19 soll die Tensorschreibweise bei der linear-elastischen Verformung isotroper Werkstoffe exemplarisch für eine einachsige Normalspannung sowie für einen Schubspannungszustand erläutert werden.

Beispiel 1: linear-elastische Verformung durch eine einachsige Normalspannung

Der in Abb. 1.19a gezeigte Fall einer einachsigen Normalspannung σ in *z*-Richtung lässt sich auch in Tensorschreibweise beschreiben. Aus der Tensorrechnung wird sofort ersichtlich, dass ein einachsiger Spannungszustand zu einem dreiachsigen Dehnungszustand führt. Im Folgenden werden der Spannungstensor, der Dehnungstensor und der sie verknüpfende Tensor der elastischen Nachgiebigkeiten für isotrope Werkstoffe vorgestellt.

Im 3 × 3-Spannungstensor stehen auf der Hauptdiagonalen von links oben nach rechts unten die Normalspannungen σ in x-, y- und z-Richtung. Oberhalb und unterhalb der Hauptdiagonalen stehen die Schubspannungen τ . Der Tensor ist symmetrisch. Der Grund für diese Symmetrie wird bei der Erklärung der Schubspannung genauer erläutert. In der Notation nach Voigt führen diese Symmetriegründe zu einer vereinfachten Schreibweise mit nur sechs Elementen.

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \sigma_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad \text{oder in der Notation nach Voigt} \quad \sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \\ \tau_{12} \end{pmatrix}.$$

Der Tensor des *einachsigen* Spannungszustands bei Zugbeanspruchung in *z*-Richtung (Normalspannung σ in Abb. 1.19a) nimmt folgende Form an:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad \text{oder in der Notation nach Voigt} \quad \sigma_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{33} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Mit Hilfe des Tensors der elastischen Nachgiebigkeiten S_{ij} für isotrope Werkstoffe in der Notation nach Voigt lässt sich aus einem vorliegenden Spannungstensor der Tensor der

elastischen Dehnungen berechnen:

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0\\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0\\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{pmatrix}$$

Damit ergibt aus der *einachsigen* Spannung mit Hilfe der Matrizenmultiplikation nach Voigt

 (\ldots)

$$\varepsilon_j = S_{ij} \cdot \sigma_i$$

ein dreiachsiger Dehnungstensor

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{-\nu}{E} \cdot \sigma_{33} & 0 & 0\\ 0 & \frac{-\nu}{E} \cdot \sigma_{33} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{E} \cdot \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad \text{oder nach Voigt} \quad \varepsilon_j = \begin{pmatrix} \frac{-\nu}{E} \cdot \sigma_{33} \\ \frac{-\nu}{E} \cdot \sigma_{33} \\ \frac{1}{E} \cdot \sigma_{33} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Der Elastizitätsmodul *E*, der Schubmodul *G* und die Querkontraktionszahl ν lassen sich folgendermaßen ineinander umrechnen:

$$G = \frac{E}{2 \cdot (1+\nu)} \,.$$

Die Querkontraktionszahl ν ergibt sich bei einachsiger Zugbeanspruchung in *z*-Richtung als Quotient aus der Normaldehnung senkrecht zur Lastachse (negative Querdehnung ε_q in *x*- oder *y*-Richtung, d. h. ε_{xx} bzw. ε_{11} oder ε_{yy} bzw. ε_{22}) und der Normaldehnung in Belastungsrichtung (Längsdehnung ε_1 bzw. ε_{zz} oder ε_{33} in *z*-Richtung). Das dem Quotienten voranstehende negative Vorzeichen eliminiert das negative Vorzeichen der Querdehnung:

$$u = -\frac{\varepsilon_{11}}{\varepsilon_{33}} = -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{33}} = -\frac{\varepsilon_{q}}{\varepsilon_{l}}.$$

Bei isotropen Materialien besteht unter einachsiger Beanspruchung *in Richtung der wirkenden Kraft* (im Beispiel oben wäre das die *z*-Richtung) ein einfacher Zusammenhang zwischen der mechanischen Normalspannung σ und der Längsdehnung ε_1 über den *E*-Modul:

$$\varepsilon_l = \frac{1}{E} \cdot \sigma$$
.

Dieses vereinfachte eindimensionale Hooke'sche Gesetz für einachsige Spannungszustände gilt nur in Richtung der äußeren Kraft, berücksichtigt ausschließlich die Längsdehnung und lässt sich aus der obigen Tensorrechnung ableiten. Umgekehrt bewirken elastische Dehnungen, z. B. die thermische Ausdehnung fest eingespannter Bauteile, wiederum innere Spannungen im Werkstoff. Dabei hängen die Tensoren der mechanischen Spannung σ_i und der Dehnung ε_j für isotrope Werkstoffe gemäß der Voigt'schen Notation über folgenden Tensor der elastischen Konstanten C_{ij} zusammen:

Beispiel 2: linear-elastische Verformung durch eine Schubspannung

Zur Vollständigkeit soll auch kurz die Tensorschreibweise für den Fall einer Schubspannung τ und der resultierenden Scherung γ erläutert werden. Die Schubkraft *F* in Abb. 1.19b wirkt in der Ausgangsfläche A_0 mit einer Ebenennormalen in *z*-Richtung ("*z*-Ebene") in Richtung *y*. Die entsprechende Schubspannung τ

$$\tau = \frac{F}{A_0}$$

wird daher τ_{zy} oder τ_{32} genannt. Die gezeigte Scherung γ

$$\gamma = \frac{\Delta L}{L_0}$$

bezieht sich auf die Ausgangslänge L_0 in z-Richtung bei einer Längenänderung ΔL in Richtung y. Sie wird daher mit γ_{zy} oder γ_{32} indiziert. Ferner gilt für kleine elastische Scherungen

$$\gamma = \tan \alpha$$

der lineare Zusammenhang zwischen Scherung und Schubspannung über den Schubmodul *G*:

 $\tau = G \cdot \gamma \, .$

In Abb. 1.19b ist die Schubspannung τ_{zy} (bzw. τ_{32}) gezeigt. Sie wirkt in einer Ebene mit der Ebenennormale z ("z-Ebene", erster Index) in Richtung y (zweiter Index). Würde der in Abb. 1.19b gezeigte Körper frei schweben, würde er unter Einwirkung der Kraft F beginnen, sich gegen den Uhrzeigersinn zu drehen. Bauteile sind jedoch fest eingebaut, aufliegend oder eingespannt und drehen sich dadurch nicht. Durch diese Auflage oder Einspannung wird das Drehmoment durch ein entgegengesetztes Drehmoment kompensiert, das im Uhrzeigersinn wirkt. Dieses erzeugt wiederum eine weitere Schubspannung, die in Abb. 1.19b *nicht* gezeigt ist. Es handelt sich um die Schubspannung τ_{yz} (bzw. τ_{23}), die in der "y-Ebene" (mit der Ebenennormale y) in Richtung z und damit τ_{32} entgegenwirkt.

So kommt es, dass der Spannungstensor symmetrisch ist mit

$$\tau_{ij} = \tau_{ji}$$

Für Abb. 1.19b nimmt der Spannungstensor die folgende symmetrische Form an:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{23} \\ 0 & \tau_{32} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder nach Voigt} \quad \sigma_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau_4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \tau_4 = \tau_{32} = \tau_{23} \,.$$

Gemäß Abb. 1.19b ergibt sich der elastische Dehnungstensor damit nach Voigt zu:

$$\varepsilon_{j} = S_{ij} \cdot \sigma_{i},$$

$$\varepsilon_{i} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \gamma_{4} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder als } 3 \times 3 \text{-Matrix} \quad \varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & 0 \end{pmatrix}.$$

Zwischen einer Scherung γ im 6 × 1-Dehnungstensor nach Voigt und einer Schubdehnung ε im symmetrischen 3 × 3-Dehnungstensor ist folgender Zusammenhang zu beachten:

$$\varepsilon_{32} = \varepsilon_{23} = \frac{1}{2} \cdot \gamma_4 = \frac{1}{2} \cdot \gamma_{32}$$
 mit $\gamma_4 = \gamma_{32} = \gamma_{23}$.

In Abb. 1.19b entspricht die gezeigte Scherung γ der Scherung γ_{32} . Sie bezieht sich auf die Ausgangslänge L_0 in z-Richtung bei einer Längenänderung ΔL in y-Richtung.

1.4.3 Vertiefung: linear-elastische Tensoren und Anisotropiefaktor für kubische Einkristalle

Für das kubische Kristallsystem (kfz, krz, Diamant- und Zinkblendestruktur), d. h. für einkristalline Materialien wie Nickelbasissuperlegierungen für einkristalline Turbinenschaufeln, Diamant oder Halbleiter, gelten folgende Zusammenhänge. Die Tensoren der Dehnung ε_i und der mechanischen Spannung σ_j hängen gemäß der Voigt'schen Notation über den Tensor der elastischen Nachgiebigkeiten S_{ij} zusammen:

$$\varepsilon_i = S_{ij} \cdot \sigma_j \quad \text{mit} \quad S_{ij} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix}.$$

Die Tensoren der mechanischen Spannung σ_i und Dehnung ε_j hängen gemäß der Voigt'schen Notation bei anisotropen einkristallinen kubischen Werkstoffen über den Tensor C_{ij} der elastischen Steifigkeiten zusammen:

$$\sigma_i = C_{ij} \cdot \varepsilon_j \quad \text{mit} \quad C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

Aus diesem Tensor lässt sich auch die Anisotropie oder Richtungsabhängigkeit des *E*-Moduls ableiten. Für *kubische Systeme* von Metall-, Halbleiter- oder Ionenkristallen ergibt sich der *Anisotropiefaktor* für den richtungsabhängigen *E*-Modul zu

$$A = \frac{2 \cdot C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$$

Ist der Anisotropiefaktor größer als eins, so ist der *E*-Modul in den $\langle 111 \rangle$ -Richtungen am größten. Dies ist für die meisten kubischen Metalle wie z. B. Gold, Kupfer, α -Eisen, Nickel, Lithium, Natrium, Kalium oder Aluminium sowie für viele Halbleiter wie Silizium, Germanium oder Diamant der Fall.

Ist der Anisotropiefaktor nahe bei eins, so verhält sich der *E*-Modul nahezu isotrop. Dies ist z. B. bei Wolfram der Fall. Ist der Anisotropiefaktor kleiner als eins, so ist der *E*-Modul in den (100)-Richtungen am größten. Dies gilt für die Keramik Titancarbid oder die kubischen Ionenkristalle von Natriumchlorid (Kochsalz) oder Kaliumchlorid.

1.5 Plastische Verformung der Metalle

Die größtmögliche elastische Verformung liegt für die meisten Materialien weit unter 1 % Dehnung. Bei höherer Belastung brechen spröde Werkstoffe. Bei Metallen beginnt bei Überschreiten einer kritischen Last die plastische Verformung durch Versetzungsgleiten. Atome wechseln dabei irreversibel ihre Position. Die zur plastischen Verformung benötigte kritische mechanische Spannung wird je nach Werkstoff als "Fließgrenze", "Streckgrenze" oder "0.2 % Dehngrenze" bezeichnet (siehe Abschn. 4.1.2). Sie ist ein Festigkeitskennwert und wird in Megapascal (MPa) angegeben. Festigkeiten sind ein Maß für die Widerstandsfähigkeit eines Werkstoffes gegen *plastische* (d. h. bleibende, irreversible) Verformung oder gegen Bruch (bei spröden Werkstoffen ohne plastische Verformung).

1.5.1 Vereinfachte Betrachtung der plastischen Verformung

Die plastische Verformung in Metallen erfolgt bei Raumtemperatur in der Regel durch Versetzungsgleiten. Versetzungen können unter der Einwirkung einer parallelen (tangentialen) Kraft auf einer Gleitebene durch den Kristall wandern. Bei hypothetisch völlig versetzungsfreien Kristallen geschieht das Abgleiten in einer Gleitebene nur unter sehr hoher



Abb. 1.20 Vereinfachtes Modell der plastischen Verformung durch Versetzungsgleiten: Wanderung einer Stufenversetzung durch einen Kristall. Die Versetzung kann dabei als eingeschobene Halbebene beschrieben werden, deren untere Begrenzung die Versetzungslinie ist, die in der Gleitebene liegt und sich dort weiterbewegt (hier: von links nach rechts). Diese Darstellung reicht für ein vereinfachtes Verständnis der plastischen Verformung in Metallen durch Versetzungsgleiten vollkommen aus.

Schubspannung, da sämtliche Atome in der Ebene den Gleitschritt synchron vollziehen müssten. Sind hingegen Versetzungen vorhanden, so genügt eine weitaus geringere Schubspannung, um ein Abgleiten zu erreichen. Der Grund liegt darin, dass im Kristall mit Versetzungen das Abgleiten wegen der Versetzungsbewegung stufenweise erfolgt (Abb. 1.20). Die für das Abgleiten erforderliche kritische Schubspannung ist dabei um das 100- bis 1000-Fache geringer als im ungestörten Kristall.

Bei der plastischen Deformation von Kristallen werden fortlaufend neue Versetzungen gebildet. Diese Versetzungsneubildung führt dazu, dass sich die Versetzungen immer stärker gegenseitig behindern, die Versetzungsbewegung immer schwieriger wird und schließlich ganz zum Stillstand kommt. Die Folge ist eine Verfestigung des Materials aufgrund von Kaltumformung. Anhand einer Analogie lässt sich das Phänomen erklären. Wenn in einem Raum nur wenige Personen vorhanden sind, so ist die Personenzirkulation einfach. Sind aber sehr viele Personen im Raum, so ist eine Fortbewegung erschwert bzw. unmöglich.

1.5.2 Vertiefende Betrachtung der plastischen Verformung

Ein tieferes Verständnis von Versetzungen und plastischer Kristallverformung erfordert ein profundes Wissen über Kristallstrukturen und ein gutes dreidimensionales Vorstellungsvermögen. Bildlich gesprochen bilden und breiten sich Versetzungen auf einer Gleitebene als kreisförmige Linien aus wie Wellen auf einer glatten Wasseroberfläche, auf die ein Stein geworfen wurde. Der Ursprung eines Versetzungsrings ist dabei eine so genannte Frank-Reed-Quelle. Segmente des sich ausbreitenden Versetzungsrings haben Stufencharakter (siehe auch Abb. 1.11, Stufenversetzung), andere Segmente 90° dazu verdreht haben Schraubencharakter (siehe auch Abb. 1.12, Schraubenversetzung) und die Segmente dazwischen gemischten Charakter. Auf mikroskopischer Ebene bewegen sich die Atome, wenn die Versetzungslinie über sie hinweggeht, auf möglichst dicht gepackten Gleitebenen in möglichst dicht gepackte Richtungen. Die Sprungweite eines Versetzungsschrittes (Burgers-Vektor) und die dazu benötigte Energie sind dann gering.

Da sich Versetzungen als Ringe oder gebogene Linien auf einer Gleitebene im Kristall bzw. Korn ausbreiten, ist die Wanderungsrichtung der Versetzungslinie nur an bestimmten Stellen identisch mit der Sprungrichtung der Atome bei der plastischen Verformung – nämlich dort, wo die Versetzungslinie Stufencharakter hat. Besitzt das betrachtete Segment der Versetzungslinie Schrauben- oder gemischten Charakter, ist dies nicht der Fall.

Die Atome, über die die Versetzungslinie hinweggeht – egal in welche Richtung – machen alle den gleichen Sprung in die gleiche Richtung des Burgers-Vektors (Gleitrichtung in der Gleitebene). Hat also ein Versetzungsring überall im Kristall die Korngrenzen erreicht, so hat sich der Kristall auf dieser Gleitebene komplett um einen Atomabstand in Richtung des Burgers-Vektors plastisch verformt.

Auf diese Weise ist jede Versetzung eindeutig charakterisiert über ihre Gleitebene, ihren Burgers-Vektor (Sprungrichtung der Atome) und über die Sprungweite der Atome. Gleitebene und Burgers-Vektor einer Versetzung sowie die Linienrichtung und damit der Cha-



Abb. 1.21 Tieferes Verständnis der plastischen Verformuna durch Versetzunasaleiten. Entstehung (Frank-Reed-Quelle) und Ausbreitung von Versetzungen auf einer Gleitebene in einem Kristall unter einer Schubspannung τ . Versetzungen sind in Metallen nach der Kristallisation bereits in großer Zahl vorhanden. Unter Schubspannung wandern sie auf ihren Gleitebenen. Bleiben sie zwischen zwei Hindernissen hängen, z. B. an Fremdatomen, baucht sich die Versetzungslinie aus und krümmt sich unter der Schubspannung so stark, dass sie die Hindernisse komplett umschließt und einen Kreis bildet. Eine neue Versetzung entsteht dabei, während die alte Versetzungslinie zwischen den beiden Hindernissen durch Zusammenklappen der konkaven Segmente auf der Rückseite des sich neu bildenden Versetzungsrings wiederhergestellt wird. Wo der Burgers-Vektor, d. h. die Sprungrichtung der Atome (roter Pfeil), senkrecht auf der (blauen) Versetzungslinie steht, hat die Versetzung Stufencharakter (Drei-Uhr- und Neun-Uhr-Position im Bild). Wo er parallel zur Versetzungslinie verläuft, hat sie Schraubencharakter (Sechs-Uhr- und Zwölf-Uhr-Position), und dazwischen gemischten Charakter. Zwischen den zwei Hindernissen bleibt das ursprüngliche Versetzungssegment zurück und der Mechanismus beginnt von neuem, viele Tausende Male (Versetzungsmultiplikation). Die neu entstandenen Versetzungen breiten sich auf ihren Gleitebenen im Kristall wie konzentrische Wellen auf einer glatten Wasseroberfläche aus, bis sie auf die Korngrenzen oder die Werkstückoberfläche treffen. Dort treten die Versetzungen aus dem Kristall aus. Der gesamte Kristall hat sich dann um jeweils einen Atomabstand in Richtung des Burgers-Vektors plastisch verformt.



Abb. 1.22 Die zwölf Gleitsysteme im kfz Gitter. Es gibt vier Gleitebenen vom Typ {111}, rot markiert. In jeder Gleitebene existieren drei Gleitrichtungen vom Typ (110), blau markiert. Das ergibt zwölf Gleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2}$ (110) {111}. Die Atome an der Versetzungsfront springen dabei um die halbe Länge der Flächendiagonalen vom Typ (110), d. h. um einen Abstand direkt aneinandergrenzender Atome. Der überstrichene Index $\overline{1}$ bedeutet -1.

rakter eines bestimmten Segments eines Versetzungsrings (Stufen-, Schrauben- oder gemischter Charakter) lassen sich im Beugungskontrast eines Transmissionselektronenmikroskops (TEM) bestimmen. Die Lage der Atome lässt sich sogar direkt im Phasenkontrast des TEM betrachten.

Die Abb. 1.21 beschreibt die Entstehung und Ausbreitung einer Versetzung nach dem Frank-Reed-Mechanismus – allerdings aus Gründen der Vereinfachung in einem kubisch primitiven Gitter. Nur das radioaktive Element Polonium, von Marie Curie entdeckt, kristallisiert in dieser einfachen Gitterstruktur. Die meisten Metalle besitzen eine kfz, krz oder hdp Struktur. Für Verständniszwecke ist die folgende Betrachtung trotzdem ausreichend.

Im kfz Gitter (Gold, Silber, Kupfer, Aluminium, γ -Eisen) gibt es zwölf Gleitsysteme auf vier Gleitebenen mit jeweils drei möglichen Gleitrichtungen (Abb. 1.22). Die Gleitsysteme sind vom Typ $\frac{1}{2}$ (110) {111}. Die Atome an der Versetzungslinie springen in dem Moment, in dem die Versetzungslinie über sie hinweggleitet, um die Hälfte einer Flächendiagonalen der kfz Elementarzelle in eine Richtung vom Typ (110), was einem Atomabstand im kfz Gitter in dieser dichtest gepackten Richtung entspricht, auf einer dichtest gepackten Ebene vom Typ {111}.

Im krz Gitter (α -Eisen) gibt es zwölf Hauptgleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2}$ (111) {110}. In den sechs primären Gleitebenen vom Typ {110} existieren jeweils zwei Gleitrichtungen vom Typ (111). Die Atome an der Versetzungsfront springen dabei um einen Abstand direkt aneinandergrenzender Atome entlang der halben Raumdiagonale vom Typ (111) auf Gleitebenen vom Typ {110}. Abbildung 1.23 zeigt die zwölf Hauptgleitsysteme des krz Gitters.

Da es sich bei den Ebenen vom Typ {110} nicht um wirklich dichtest gepackte Ebenen wie im kfz und hdp Gitter handelt, können geringfügig höhere mechanische Spannungen als die Fließgrenze auch zum Versetzungsgleiten auf anderen ähnlich dicht gepackten Ebenen führen. Auch in diesen sekundären Gleitebenen sind die dichtest gepackten Richtungen vom Typ $\langle 111 \rangle$ enthalten. Im krz Gitter sind das weitere zwölf Gleitebenen vom Typ {112} und 24 weitere Gleitebenen vom Typ {123}, die jeweils eine dichtest gepackte Gleitrichtung vom Typ $\langle 111 \rangle$ enthalten (Abb. 1.24). In dieser Gleitrichtung springen die Atome an der



Abb. 1.23 Die zwölf Haupt-Gleitsysteme im krz Gitter. Es gibt sechs Gleitebenen vom Typ {110}, blau markiert. In jeder Gleitebene existieren zwei Gleitrichtungen vom Typ $\langle 111 \rangle$, rot markiert. Das ergibt zwölf Gleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2}$ (111) {110}. Die Atome an der Versetzungsfront springen dabei um die halbe Länge der Raumdiagonalen vom Typ (111), d. h. um einen Abstand direkt aneinandergrenzender Atome. Der überstrichene Index $\overline{1}$ bedeutet -1.

Versetzungsfront wiederum um einen Abstand aneinandergrenzender Atome bzw. um $\frac{1}{2}$ Länge der Raumdiagonalen. Es gibt also zwölf weitere Gleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{112\}$ und 24 weitere Gleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{123\}$. So kommt das krz Gitter auf insgesamt 48 Gleitsysteme.

Im hdp Gitter (z. B. Mg, Zn, α -Ti und Cd) existiert eine Hauptgleitebene (001) mit drei Gleitrichtungen [100], [010] und [110]. Das ergibt insgesamt drei Gleitsysteme (Abb. 1.25). Bei hohen Temperaturen können in manchen hdp Metallen noch weitere Gleitsysteme aktiviert werden.

Bei angelegter Normalkraft F (z. B. Zugkraft) lässt sich die auf ein Gleitsystem wirkende Schubspannung gemäß dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz berechnen (Abb. 1.26).

Die Scherkraft F_b auf der Gleitebene A in Richtung des Burgers-Vektors b ergibt sich zu:

$$F_{\rm b} = F \cdot \cos \alpha$$
.

Die Schubspannung τ auf der Gleitebene A in Richtung des Burgers-Vektors b ist:

$$\tau = \frac{F_b}{A} \, .$$



Abb. 1.24 Im krz Gitter gibt es noch zwölf weitere Gleitsysteme des Typs $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{112\}$ und 24 weitere Gleitsysteme vom Typ $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{123\}$. Es ist je eines dieser Systeme exemplarisch gezeigt. Die Gleitebene ist jeweils blau markiert, die Gleitrichtung vom Typ $\langle 111 \rangle$ rot.



Abb. 1.25 Die drei Hauptgleitsysteme auf nur einer Gleitebene im hdp Gitter. Die rot markierten dichtest gepackten Ebenen sind kristallographisch identische Gleitebenen. Die dichtest gepackten Richtungen sind blau markiert. Die Atome an der Versetzungsfront springen dabei um einen Abstand direkt aneinandergrenzender Atome.

Mit

$$A = \frac{A_0}{\cos\beta}$$

und der Normalspannung

$$\sigma = \frac{F}{A_0}$$

ergibt sich durch Einsetzen das Schmid'sche Schubspannungsgesetz

$$\tau = \sigma \cdot \cos \alpha \cdot \cos \beta \, .$$

Die Schubspannung τ wird maximal, wenn die Winkel α und β den Wert von 45° annehmen. Dann gilt

$$\tau_{\rm max} = 0.5 \cdot \sigma \, .$$

Die Gleitsysteme, die sehr nahe bei dieser Orientierung der maximalen Schubspannung liegen, werden (als Erste) aktiviert. In kfz und krz Strukturen mit ihren vielen Gleitsystemen



Abb. 1.26 (a) Zeichnung zur Erläuterung des Schmid'schen Schubspannungsgesetzes. Dabei ist *A* (rot) eine Gleitebene, *b* die Richtung des Burgers-Vektors in dieser Gleitebene (Gleitrichtung, blau) und *N* die Ebenennormale der Gleitebene *A*. (b) Sichtbare Gleitebenenstufen (oben im Bild) an einer einkristallinen polierten Zugprobe. An diesen Stufen ist der Austritt Tausender Versetzungen auf Gleitebenen an der Oberfläche sichtbar. Gemäß Schmid'schem Schubspannungsgesetz sind die Gleitebenen aktiv, deren Neigung nahe 45° zur Normalkraft *F* liegt, auf denen also die größten Schubspannungen wirken.

ist die Wahrscheinlichkeit, dass auf eines oder mehrere dieser Gleitsysteme bei Einwirkung einer äußeren Kraft F eine hohe Schubspannung τ wirkt, relativ hoch. In hdp Strukturen mit ihren wenigen Gleitsystemen ist diese Wahrscheinlichkeit eher gering. Auf Gleitsystemen ohne oder mit geringer Schubspannungskomponente ist plastische Verformung schwierig. Daher sind hdp Strukturen im Allgemeinen schlecht plastisch kaltumformbar.

Im kfz Gitter haben die Atome aufgrund der Stapelfolge der {111}-Gleitebenen die Möglichkeit, statt in $\langle 110 \rangle$ -Richtung auch in eine $\langle 112 \rangle$ -Richtung zu springen (kürzere Sprungweite). Man spricht dann nicht von einer vollständigen, sondern von einer partiellen Versetzung. Diese verursacht einen Stapelfehler der dichtest gepackten {111}-Ebenen, also statt *ABC* gibt es nun eine Stapelfolge *ABC ACA BCA*. Die rot markierte Ebene *A* soll dabei die Gleitebene der partiellen Versetzung sein. Bei drei (oder mehr) übereinander folgenden Stapelfehlern spricht man von einem Zwillingsfehler, bei dem die Stapelfolge spiegelverkehrt verläuft (*ABC ABCBA CBA*, die rot markierte Ebene *C* ist die Spiegelebene in der Stapelfolge).

Solche Stapel- und Zwillingsfehler sind typisch für die kfz Austenitstruktur von rostfreiem Chrom-Nickel-Edelstahl, für Kupferlegierungen, aber auch für plastisch verformte Ausscheidungen der intermetallischen Phase Ni₃Al mit L1₂-Struktur in Nickelbasissuperlegierungen, die auf der kfz Struktur basieren, oder in Formgedächtnislegierungen aus Nitinol (NiTi). Abbildung 1.27 zeigt Stapelfehler in Ni₃Al-Ausscheidungen von Turbinenschaufeln, die bei einer plastischen Verformung entstanden sind, aufgenommen mit dem Transmissionselektronenmikroskop (TEM) im Beugungskontrast.

In Formgedächtnislegierungen wie Nitinol (NiTi) ist die so genannte Zwillingsbildung ein wichtiger plastischer Verformungsmechanismus bei Raumtemperatur, wenn die so genannte martensitische Phase vorliegt. Wird die Legierung erwärmt, so dass sich die martensitische Struktur in eine austenitische Struktur umwandelt, verschwinden die durch mechanische Verformung erzeugten Zwillinge wieder und damit auch die plastische Verfor-



Abb. 1.27 Drei Stapelfehler in Ni₃Al-Ausscheidungen einer einkristallinen Nickelbasissuperlegierung für Turbinenschaufeln nach einer plastischen Verformung bei 950 °C. (a) Die Stapelfehler sind durch die flächigen Streifenmuster in der Aufnahme des Transmissionselektronenmikroskops erkennbar (TEM, Einstrahlrichtung [001], Beugungskontrast). Die Partialversetzung, die den Stapelfehler oben links verursacht hat, ist auf einer (111)-Ebene in die Ausscheidung eingedrungen, hat dann die Gleitebene gewechselt und die Ni₃Al-Ausscheidung über eine ($\overline{111}$)-Ebene wieder verlassen. Die Partialversetzung, die den Stapelfehler unten rechts hinterlassen hat, ist komplett auf einer ($11\overline{1}$)-Ebene durch die Ausscheidung durchgelaufen und hat einen entsprechend großen Stapelfehler hinterlassen. Die Partialversetzung unten links ist noch innerhalb der Ni₃Al-Ausscheidung sichtbar. Sie befindet sich auf der Gleitebene ($1\overline{11}$) und erzeugt gerade einen Stapelfehler. Damit sind alle vier Gleitebenen an der plastischen Verformung bei dieser hohen Temperatur beteiligt. (b) In dieser Aufnahme wurde die Probe so gekippt, dass der Elektronenstrahl parallel zur [011]-Richtung liegt und somit zwei der vier Gleitebenen, nämlich ($1\overline{11}$) und ($11\overline{1}$), und damit auch die auf diesen Gleitebenen liegenden Stapelfehler (unten links und unten rechts) auf Kante stehen. So konnten alle vier Gleitebenen vom Typ {111} eindeutig identifiziert werden.

mung, bevor die Legierung durch Abkühlen wieder in den martensitischen Zustand übergeht. Die Legierung hat sich an ihre ursprüngliche Form vor der plastischen Verformung "erinnert".

Bei hohen Temperaturen wird die plastische Verformung verstärkt durch Diffusion. Dabei diffundieren die Atome und nehmen neue Plätze ein, um der äußeren mechanischen Spannung auszuweichen. Die Diffusion erfolgt sehr stark entlang der Korngrenzen, wo eine größere Unordnung als im Kristallgitter und damit mehr Platz für die Atome vorliegt. Das ist der Grund, warum im heißen Bereich einer Flugzeug- oder Gasturbine direkt hinter der Brennkammer einkristalline Turbinenschaufeln ohne Korngrenzen verwendet werden.

1.5.3 Zusammenhang zwischen Kristallstruktur und plastischer Verformbarkeit

Metalle mit der Gitterstruktur kfz (Gold, Silber, Aluminium, Kupfer, Blei, austenitischer Stahl) sind plastisch am leichtesten verformbar. Sie haben eine sehr hohe Packungsdichte. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine der vier Gleitebenen und damit eines der zwölf Gleitsysteme entsprechend dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz günstig zur Lastachse orientiert ist und unter hoher Schubspannung steht, ist sehr hoch.

Metalle mit der Gitterstruktur krz (ferritischer Stahl, Wolfram, Chrom, Molybdän) haben zwar auch viele Gleitebenen und Gleitsysteme, aber eine geringere Packungsdichte. Sie sind plastisch etwas schwieriger zu verformen und damit fester als kfz Metalle, aber insgesamt immer noch recht gut umformbar.

Metalle mit der Gitterstruktur hdp (Magnesium, Zink, Titan) besitzen zwar wie kfz Metalle ebenfalls die größtmögliche Packungsdichte, haben aber nur eine Gleitebene. Die Wahrscheinlichkeit, dass diese Gleitebene günstig (45°) zur Lastachse orientiert ist und dort hohe Schubspannungen wirken können, ist statistisch sehr gering. Daher sind hdp Metalle unter normalen Umständen sehr fest und plastisch nur kaltumformbar (Tab. 1.1). Bei hohen Temperaturen können unter gewissen Umständen noch weitere Gleitsysteme in hdp Metallen aktiviert werden. Dadurch verbessert sich die plastische Verformbarkeit.

1.6 Verfestigung von Metallen durch Kristallbaudefekte

Da jeder Kristallbaufehler ein Hindernis für eine Versetzung darstellt, können diese Gitterfehler gezielt in Werkstoffe eingebracht werden, um die Festigkeit, d. h. die Widerstandsfähigkeit gegen plastische Verformung, zu erhöhen. Die Verfestigungsmechanismen lassen sich gemäß der Art der eingebrachten Gitterdefekte klassifizieren (Tab. 1.2).

1.6.1 0D: Mischkristallverfestigung

Innere Gitterverspannungen durch Fremdatome sind Hindernisse für das Versetzungsgleiten (Abb. 1.28). Je größer die Konzentration der Fremdatome, desto größer die Mischkristallverfestigung. Die Mischkristallverfestigung steigt mit zunehmender Atomradiendifferenz zwischen Austauschatomen und Wirtsgitteratomen, da so auch die Gitterverzerrungen zunehmen.

Kleine Einlagerungsatome (z. B. gelöster Kohlenstoff oder Stickstoff im Stahl) führen zu einem noch höheren Festigkeitsanstieg als Austauschatome.



Abb. 1.28 Gitterverzerrung durch das Spannungsfeld eines Austauschatoms. Die Versetzung (rot) wird bei ihrem Gleitvorgang behindert.

Gittertyp	Beispiele	Gleitsystem exemplarisch	Gleite Typ	benen Anzahl	Gleitrich Typ	ntungen Anzahl pro Gleit- ebene	Gleit- systeme total
kfz	Al, Cu, Ni, Au, Ag, Pt, Pb, α-Fe, δ-Fe	y y y 2 <110> (111)	{111}	4	$\frac{1}{2}\langle 110\rangle$	3	12
krz	γ-Fe, Cr, Mo, W, Ta, Nb, V, β-Ti	x ½ (111) {110}	{110}	6	$\frac{1}{2}\langle 111\rangle$	2	12
		x ½ (111) {112}	{112}	12	¹ / ₂ ⟨111⟩	1	12
		× ½ (111) {123}	{123}	24	$\frac{1}{2}\langle 111\rangle$	1	24
hdp	Mg, Zn, Cd (α-Ti, Be, Zr)	(001) (001) (001) (010) (110)	(001)	1	[100] [010] [110]	3	3

Tab. 1.1 Gleitsysteme in kfz, krz und hdp Metallen.

Dimension	Versetzungshindernis	Verfestigungsmechanismus	Festigkeitsanstieg
0	Gelöste Fremdatome im Mischkristall mit Konzen- tration <i>c</i>	Mischkristallverfestigung	$\Delta R_{p0.2} \sim c^{1/2}$
1	Versetzungen mit der Verset- zungsdichte N	Kaltverfestigung	$\Delta R_{p0.2} \sim N^{1/2}$
2	Korngrenzen bei einer mittle- ren Korngröße <i>d</i>	Feinkornverfestigung	$\Delta R_{p0.2} \sim d^{-1/2}$
3	Kohärente Ausscheidungen der Größe <i>D</i> (sowie teil- und inkohärente Ausscheidungen oder Fremdpartikel)	Ausscheidungshärtung (Di- spersionsverfestigung)	$\Delta R_{p0.2} \sim D^{1/2}$

Tab. 1.2 Überblick über die typischsten Verfestigungsmechanismen.

1.6.2 1D: Kaltverfestigung

Werden bei der plastischen Verformung zu viele Versetzungen generiert, behindern und blockieren diese sich gegenseitig beim Gleiten (Abb. 1.29).

Passiert die massive Neubildung und gegenseitige Behinderung der Versetzungen bei der plastischen Verformung unterhalb der Rekristallisationstemperatur, kommt es zur Kaltverfestigung. Der Vorgang ist vergleichbar mit einer Rushhour im Stadtverkehr. Auf den Straßen (Gleitebenen) fahren zu viele Automobile (Versetzungen) und es kommen nach Büro- oder Ladenschluss immer weitere hinzu (Versetzungsneubildung durch die plastische Verformung). An den Kreuzungen und anderen Hindernissen geht es wegen der ge-





(a)

Abb. 1.29 (a) Schematische Darstellung der gegenseitigen Behinderung von Versetzungen an Kreuzungspunkten von Gleitebenen. (b) Probe mit plastischer Verformung und sich behindernden Versetzungen (schwarze Linien) auf verschiedenen Gleitebenen unter dem Transmissionselektronenmikroskop (TEM). Die Neubildung und gegenseitige Blockierung von Versetzungen auf verschiedenen Gleitebenen führt unterhalb der Rekristallisationstemperatur zu einer Kaltverfestigung der Metalle.





genseitigen Behinderung (Stau) bald gar nicht mehr voran (Versetzungsaufstau bei sich kreuzenden Gleitebenen). Die Fortbewegung der Autos (Versetzungsgleiten) wird immer schwieriger, und schließlich kommt der Stadtverkehr (die plastische Verformung im Metall) zum Erliegen (vollständige Kaltverfestigung). Bei einer Warmumformung oberhalb der Rekristallisationstemperatur (Neubildung des Gefüges) oder bei einer Glühbehandlung des Metalls können die Versetzungen wieder ausheilen. Im Stadtverkehr sind diese Mittel zur Stauauflösung ("die Autos lösen sich durch Zufuhr thermischer Energie einfach auf") nicht verfügbar.

1.6.3 2D: Feinkornverfestigung

Versetzungen stauen sich an Korngrenzen "wie an einer Wand", die sie durch Gleiten nicht überwinden können, da dort die Gleitebenen nicht mehr weiterlaufen (Abb. 1.30). Feinkorngefüge haben viele Korngrenzen und damit viele Gleithindernisse (Feinkornhärtung). Versetzungen auf derselben Gleitebene mit demselben Burgers-Vektor können sich aufgrund ihrer Verzerrungsfelder, die sich gegenseitig abstoßen, nicht beliebig nah kommen.

Die Feinkornverfestigung führt nicht zu einer so großen Versprödung wie die Kaltverfestigung oder die anderen Verfestigungsmechanismen. Sie resultiert in einer hohen Festigkeit bei gleichzeitig guter Zähigkeit. Allerdings ist die Feinkornhärtung (wie auch die Kaltverfestigung) nicht geeignet für Anwendungen bei hohen Temperaturen, weil durch Diffusionsprozesse Rekristallisation und Kornwachstum einsetzt und die Versetzungen ausheilen.

1.6.4 3D: Ausscheidungshärtung

Auf den ersten Blick sind Phasengrenzflächen von Ausscheidungen zweidimensionale Defekte. Die Versetzungen stauen sich zunächst wie an einer Korngrenze (Abb. 1.31). Liegen diese Ausscheidungen jedoch mitten in einem Korn, wie dies bei vielen ausscheidungsgehärteten Legierungen der Fall ist, so sind Versetzungen in der Lage, die Ausscheidungen durch Umschnürung (Orowan-Mechanismus), Schneiden (bei kohärenten Ausscheidungen) oder Klettern zu überwinden. Das funktioniert bei Korngrenzen in der Regel nicht.



Abb. 1.31 Versetzungsaufstau an (a) einer Ausscheidung schematisch und (b) an einer Ni₃Al-Ausscheidung in einer Superlegierung für Turbinenschaufeln (TEM-Aufnahme).

Entsteht die zweite Phase durch intrinsische metallurgische Prozesse (Wärmebehandlung des Gefüges etc.), handelt es sich um eine Ausscheidungshärtung. Werden durch externe Zugabe zusätzliche Partikel einer keramischen Phase als Versetzungshindernisse ins Gefüge eingebaut, spricht man von Dispersionsverfestigung.

Der Festigkeitsanstieg ist abhängig von der Anzahl, Größe und Kohärenz der Ausscheidungen. Kohärente Ausscheidungen führen zu starken Gitterverzerrungen und zu einem großen Festigkeitsanstieg.

1.7 Aufgaben

Aufgabe 1.1

Wie hängen *E*-Modul, Bindungsenergie und thermischer Ausdehnungskoeffizient qualitativ zusammen?

Aufgabe 1.2

Worauf beruht die plastische Verformung von Metallen bei Raumtemperatur?

Aufgabe 1.3

In Geschirrspülern bestehen die Seitenwände häufig aus rostfreiem ferritischen Chrom-Stahl (kubisch-raumzentriert, krz). Für den Boden, der bei der Herstellung sehr großen plastischen Verformungen unterworfen wird, fällt die Wahl in der Regel auf einen rostfreien austenitischen Chrom-Nickel-Stahl (kubisch-flächenzentriert, kfz). Erklären Sie die Materialwahl für den Boden des Bottichs, argumentieren Sie dabei bitte über die Kristallstruktur.

Aufgabe 1.4

Warum sind die kfz und krz Metalle besser plastisch verformbar als das hexagonal dichtest gepackte Titan?

Aufgabe 1.5

Die Festigkeit von Metallen lässt sich erhöhen, indem den Versetzungen gezielt Hindernisse in Form von Gitterfehlern "in den Weg gelegt" werden. Nennen Sie vier Gitterfehler und die durch sie verursachten Verfestigungsmechanismen. Ordnen Sie diese nach der Dimension der Gitterfehler (null- bis dreidimensional).

Aufgabe 1.6

Federelemente in mechanischen Uhrwerken (Stellhebelfedern, metallische Spiralfedern) sind in der Regel kaltgewalzt. Warum?

Aufgabe 1.7

Nennen und erläutern Sie bitte drei Faktoren, die die Mischkristallhärtung entscheidend beeinflussen.

Aufgabe 1.8

Elektrobleche für Transformatoren bestehen aus krz Eisen mit 2–4 % Si (Mischkristall, Unterdrückung der Wirbelströme). Diese Bleche haben häufig eine Goss-Textur, d. h. die (100)-Richtungen der Kristalle liegen bevorzugt in Walzrichtung und die {110}-Ebenen parallel zur Blechoberfläche.

- a) Zeichnen Sie bitte eine krz Elementarzelle.
- b) Zeichnen Sie in diese Elementarzelle ein Elektroblech mit Goss-Textur in der korrekten Orientierung ein und kennzeichnen Sie in dieser Ebene vom Typ {110} die Walzrichtung vom Typ (100).

Aufgabe 1.9

Gezogenen Kupferdrähte besitzen eine (111)-Fasertextur, d. h., Ebenen vom Typ {111} sind senkrecht zur Drahtachse bzw. Zugrichtung des Drahts orientiert.

- a) Zeichnen Sie eine kfz Elementarzelle.
- b) Zeichnen Sie in die kfz Elementarzelle eine Ebene vom Typ {111} sowie die Richtung der Drahtachse bzw. die Zugrichtung des Drahts vom Typ (111) senkrecht dazu ein.

Zusammenfassung

Bei den Metallen dominieren drei Kristallstrukturen. Zu den kubisch-flächenzentrierten (kfz) Metallen zählen unter anderem austenitisches γ -Eisen, Aluminium, Nickel, Blei, Platin, Gold, Silber und Kupfer. Zu den kubisch-raumzentrierten (krz) Metallen zählen das α -Eisen, das δ -Eisen, Wolfram, Molybdän, Tantal, Niob, Chrom und das β -Titan. α -Titan, Magnesium, Zink und Cadmium gehören zu den hexagonal dichtest gepackten (hdp) Metallen. Einige Metalle wie das Eisen oder das Titan können je nach Temperatur, Legierungszusammensetzung oder Wärmebehandlung unterschiedliche Kristallstrukturen annehmen. Dieses Phänomen wird mit dem Begriff Polymorphie beschrieben ("Vielgestalt").

Reale Werkstoffe enthalten Gitterdefekte, z. B. Leerstellen, Fremdatome, Versetzungen, Korngrenzen oder Ausscheidungen. In anisotropen Werkstoffen (Einkristalle, polykristalline Werkstoffe mit Textur, Faserverbundwerkstoffe) sind die Eigenschaften richtungsabhängig, in isotropen und quasiisotropen Werkstoffen (amorphe und polykristalline Werkstoffe ohne Textur) hingegen richtungsunabhängig.

Der *E*-Modul ist ein Maß für die Bindungsenergie und die elastische Federkraft zwischen den Gitterbausteinen. Ein hoher *E*-Modul resultiert in einer geringen thermischen Ausdehnung. Die elastischen Eigenschaften in Werkstoffen haben Tensorcharakter. So verursacht z. B. ein einachsiger Spannungszustand eine dreiachsige elastische Verformung.

Die irreversible plastische Verformung von Metallen basiert in erster Linie auf der Bewegung von Versetzungen auf dicht gepackten Gleitebenen. Kubisch-flächenzentrierte Metalle sind wegen ihrer vielen Gleitsysteme und hohen Packungsdichte am leichtesten plastisch verformbar, gefolgt von den kubisch-raumzentrierten Metallen mit ebenfalls sehr vielen Gleitsystemen und einer etwas weniger dichten Packung. Die hexagonal dichtest gepackten Metalle sind trotz ihrer hohen Packungsdichte aufgrund der geringen Anzahl von Gleitsystemen schlechter plastisch verformbar. Metalle mit kfz oder hdp Struktur können sich neben dem klassischen Versetzungsgleiten ebenfalls unter Bildung von Stapelfehlern und Zwillingsdefekten plastisch verformen. Bei hohen Temperaturen erfolgt die plastische Verformung der Metalle zusätzlich durch atomare Diffusionsprozesse, vor allem entlang der Korngrenzen (Kriechen).

Um die Festigkeit von Metallen zu erhöhen, werden den Versetzungen gezielt Hindernisse in Form von Gitterfehlern in den Weg gestellt. Fremdatome führen zur Mischkristallverfestigung, Kaltumformung mit starker Versetzungsmultiplikation zur Kaltverfestigung, kleine Körner mit vielen Korngrenzen zur Feinkornverfestigung und die Bildung einer zweiten Phase zur Ausscheidungshärtung. Kohärente Ausscheidungen mit ihren weit in den Kristall hineinreichenden Verzerrungsfeldern sind große Versetzungshindernisse und führen zu einem sehr starken Festigkeitsanstieg.