

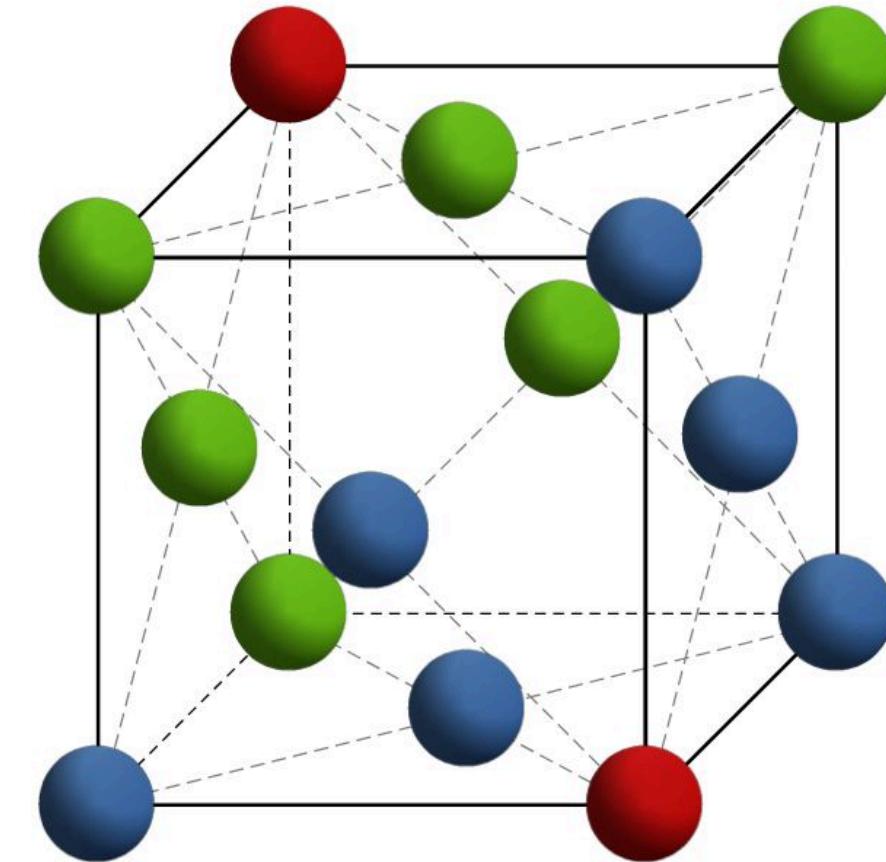
Feinstruktur

Prof. Dr.-Ing. Christian Willberg ^{id}

Kontakt: christian.willberg@h2.de

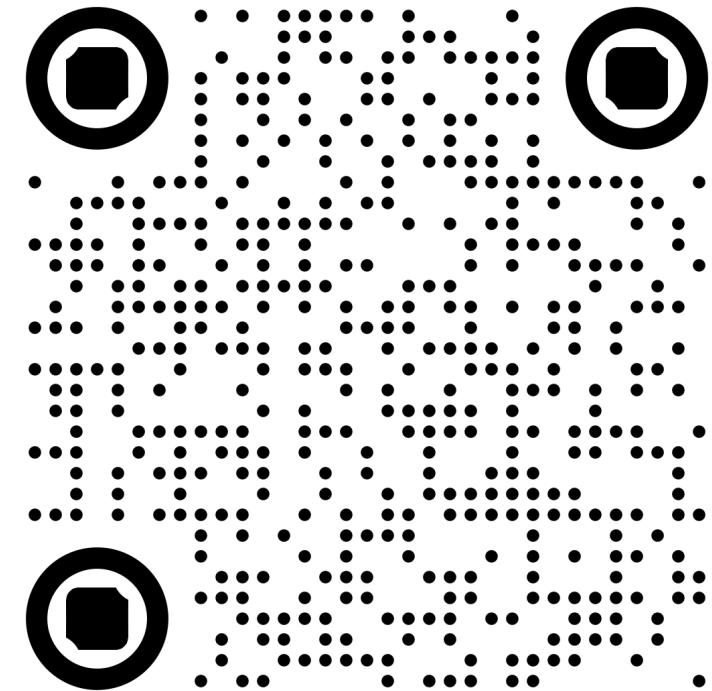
Teile des Skripts sind von

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Häberle übernommen



Inhalte

- Kristallstrukturen identifizieren und charakterisieren
- Molekülstrukturen und deren Aufbau verstehen
- Realstrukturen von Kristallen mit ihren Defekten beschreiben
- Zusammenhänge zwischen Struktur und mechanischen Eigenschaften erklären
- Plastische Verformungsmechanismen



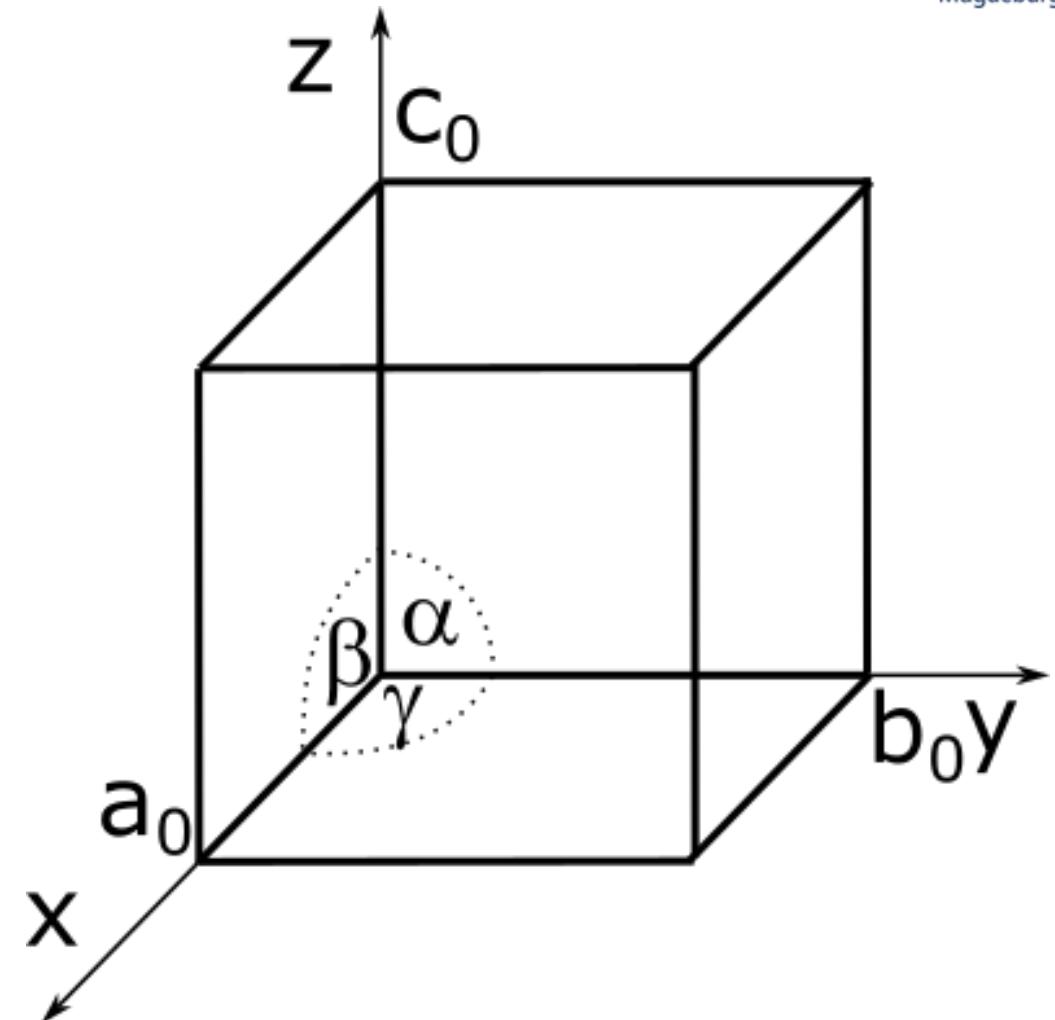
Warum ist die Feinstruktur wichtig?

Struktur bestimmt Eigenschaften

- Mechanische Eigenschaften (Festigkeit, Duktilität)
- Elektrische Leitfähigkeit
- Thermisches Verhalten
- Optische Eigenschaften
- Chemische Beständigkeit

Raumgitter

- entsteht durch die dreidimensional-periodische Verschiebung seiner Bausteine
- charakterisiert durch drei Raumachsen x, y und z liegenden Winkel α , β , γ die Abstände auf den Achsen das jeweilige Raumgitter
- a_0 , b_0 und c_0 (Gitterkonstanten)
-> Einheitszelle



Kristallsystem	Gitterkonstanten	Winkel	Beispiele
triklin	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Silikat-Minerale
monoklin	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$	Mo_2S_3 ; $\beta\text{-Pu}$
(ortho)rhombisch	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	U, S, P, Ga, $\gamma\text{-Sn}$
rhomboedrisch	$a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	As, Hg, Sb
hexagonal	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$	$\alpha\text{-Ti}$, Mg, Zn
tetragonal	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	B, CuTi_3 , Sn ($T > 13,5^\circ$)

Häufigste Gitterformen bei Metallen

Kristallsystem	Gitterkonstanten	Winkel	Beispiele
kubisch	$a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cu, Al, Ni, Au, Ag; γ -Eisen (kfz); α -Eisen, V, Cr, W (krz); Mn, Po (kp)

Kristallographische Bezeichnungen

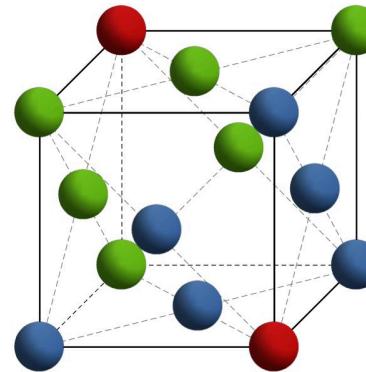
Packungsdichte = Volumen der Atome / Volumen der Einheitszelle

Miller-Indizes

- Ebenen: $(h k l)$
- Richtungen: $[h k l]$

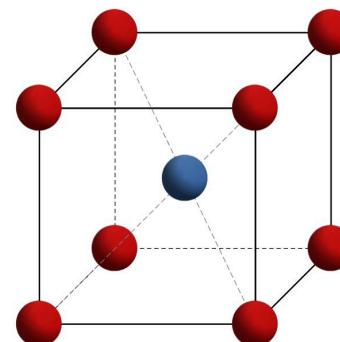
Kubisch flächenzentriert (kfz)

- 4 Atome pro Einheitszelle
- Packungsdichte: 74%
- Koordinationszahl: 12



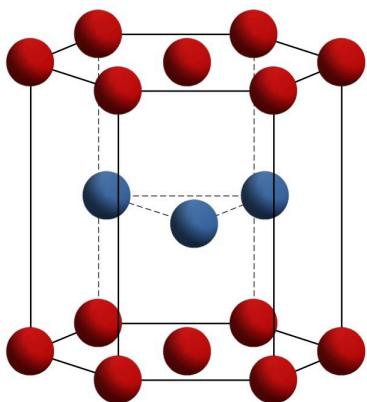
Kubisch raumzentriert (krz)

- 2 Atome pro Einheitszelle
- Packungsdichte: 68%
- Koordinationszahl: 8



Hexagonal dichteste Packung (hpd)

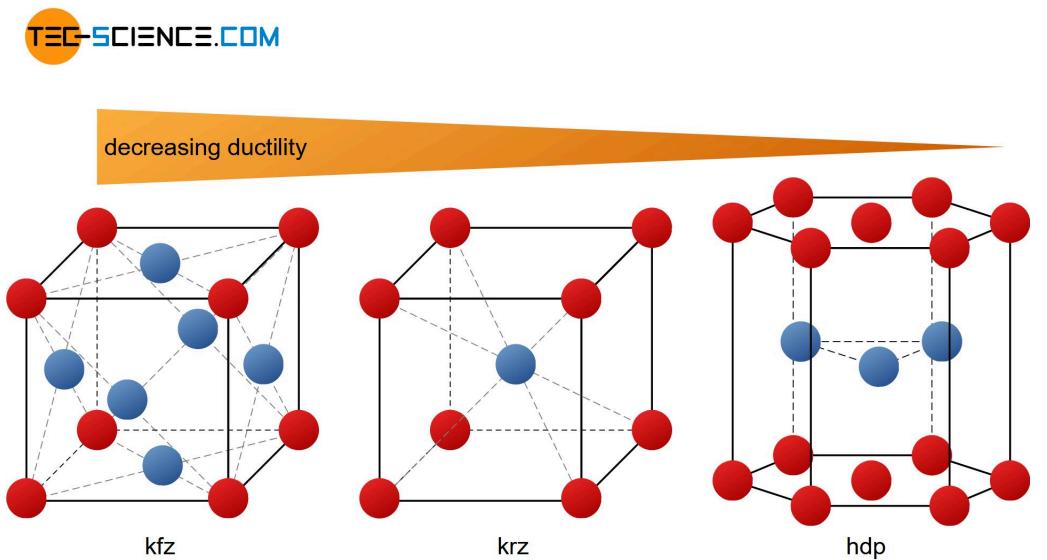
- 2 Atome pro Einheitszelle
- Packungsdichte: 74%
- Koordinationszahl: 12



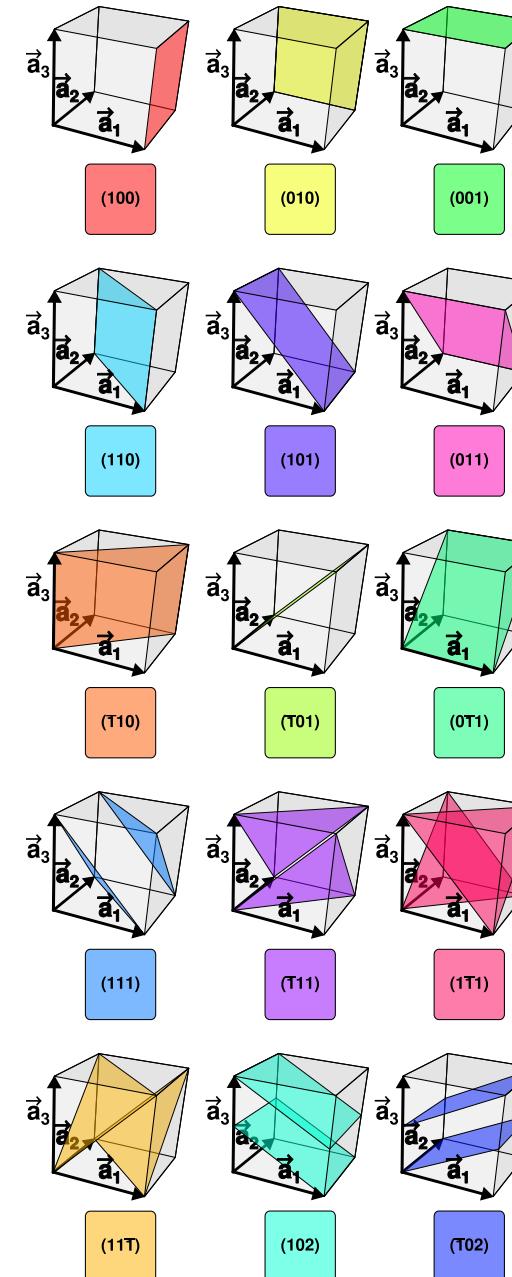
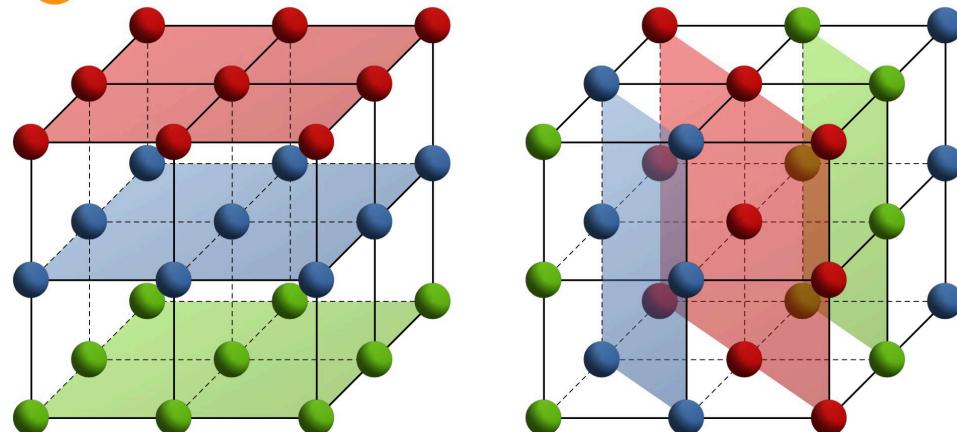
Packungsdichte und Eigenschaften

Packungsdichte = Volumen der Atome / Volumen der Einheitszelle

Struktur	Packungsdichte
kfz	74%
hdp	74%
krz	68%



Kristallebenen

Einflüsse der Kristallstruktur

- **Korrosion:** Angriff aggressiver Medien erfolgt an bevorzugten Ebenen
- **Verformung:** Plastische Verformung erfolgt entlang bevorzugter kristallografischer Ebenen und Richtungen → Gleitsysteme
- **Ultraschall:** Verwendung von Schwingquarzen mit speziellen kristallografischen Begrenzungsflächen
- **Leitfähigkeit:** Verwendung von Germanium- oder Silizium-Wafern in (1 1 1)- oder (1 0 0) - Orientierung für Halbleiterelemente
- **Magnetisierung:** leichteste Magnetisierung von Eisen-Silizium-Transformatorenblechen entlang der Würfelkante [1 0 0]

Anisotropie in Kristallen

Anisotropie =

Richtungsabhängigkeit der
Eigenschaften

Beispiele:

- Elastizitätsmodul variiert mit Kristallrichtung
- Thermische Ausdehnung richtungsabhängig
- Optische Eigenschaften (Doppelbrechung)

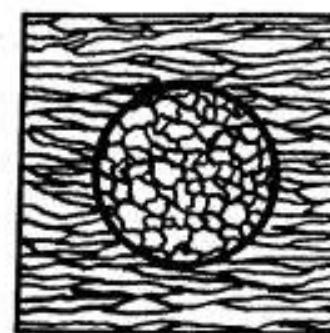
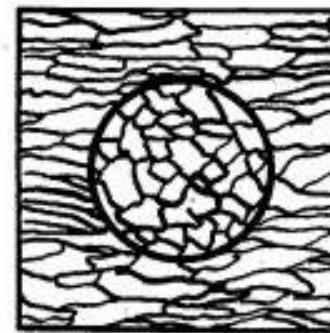
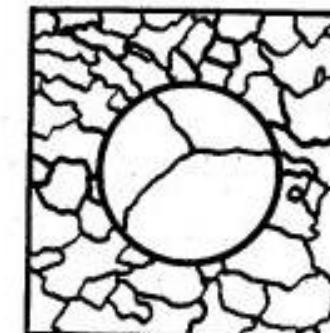
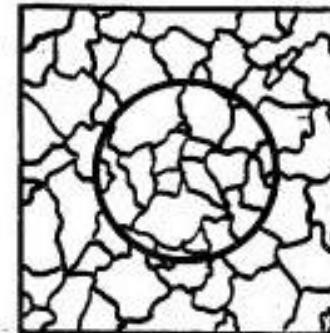


Bild 94. Veränderung des Gefüges bei plastischer Umformung (quadratische Felder) und Rekristallisationsgefüge (runde Felder) in schematischer Darstellung
a) nicht umgeformt
b) 10 % umgeformt
c) 50 % umgeformt
d) 75 % umgeformt

Praktische Bedeutung:

Polymorphie bei Metallen

- **Polymorphie:** ist die Ausbildung von verschiedenen Gitterstrukturen in Abhängigkeit von der Temperatur
- die verschiedenen Gitterformen sind die **allotropen Modifikationen**

(auch: Polymorphie des Kohlenstoffs: Graphit, Diamant, Fulleren, Graphen)

Technische Bedeutung:

- Wärmebehandlung von Stahl
- Formgedächtnislegierungen
- Phasenumwandlungshärtung

Beispiel: Eisen-Polymorphie

Phase	Struktur	Temperatur	Eigenschaften
α -Fe	krz	< 911°C	Ferromagnetisch
γ -Fe	kfz	911-1392°C	Paramagnetisch
δ -Fe	krz	1392-1538°C	Paramagnetisch

Volumänderung bei Umwandlung:

- $\alpha \rightarrow \gamma$: Volumenkontraktion (-1%)
- $\gamma \rightarrow \alpha$: Volumenexpansion (+1%)

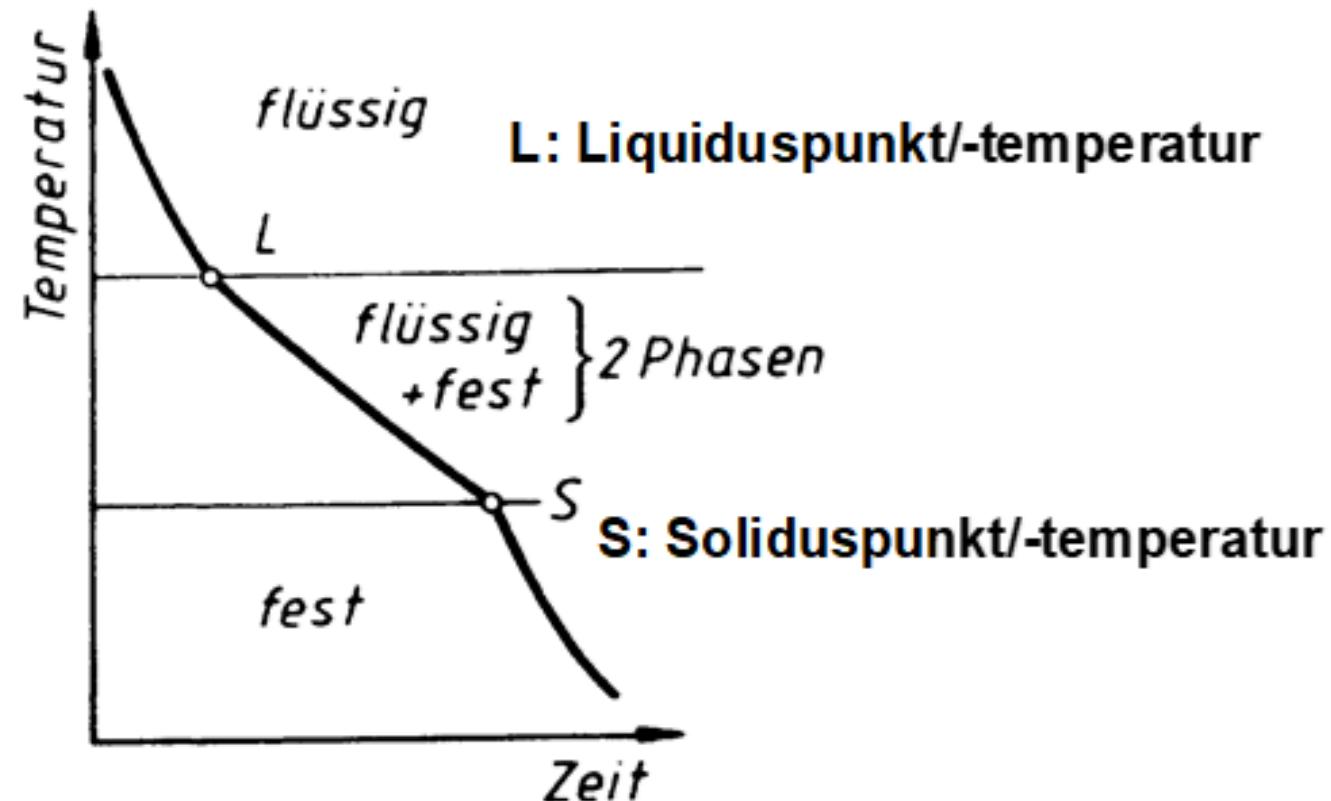
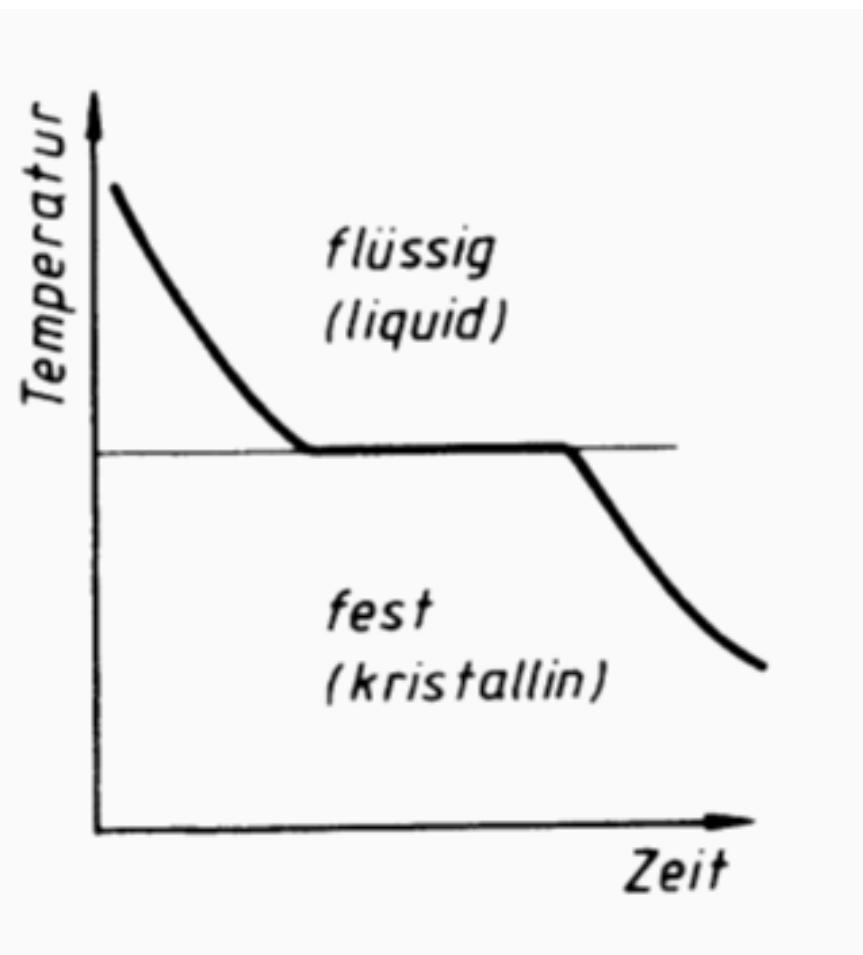
Bestimmung der Umwandlungspunkte

Dilatometrie

- Messung der Längenänderung aufgrund der Gitterumwandlung
- Präzision: $\pm 0.1 \mu\text{m}$
- Anwendung: Bestimmung kritischer Temperaturen

Thermische Analyse (DTA/DSC)

- Aufzeichnung des Temperaturverlaufs
- Gitterwandlerungen (Phasenänderungen) brauchen Wärmeenergie oder geben sie ab
- Halte- bzw. Knickpunkte in den Erwärmungs- oder Abkühlungskurven
- Haltepunkte: bei reinen Metallen
- Knickpunkte: bei Legierungen



Molekülstrukturen - Einführung

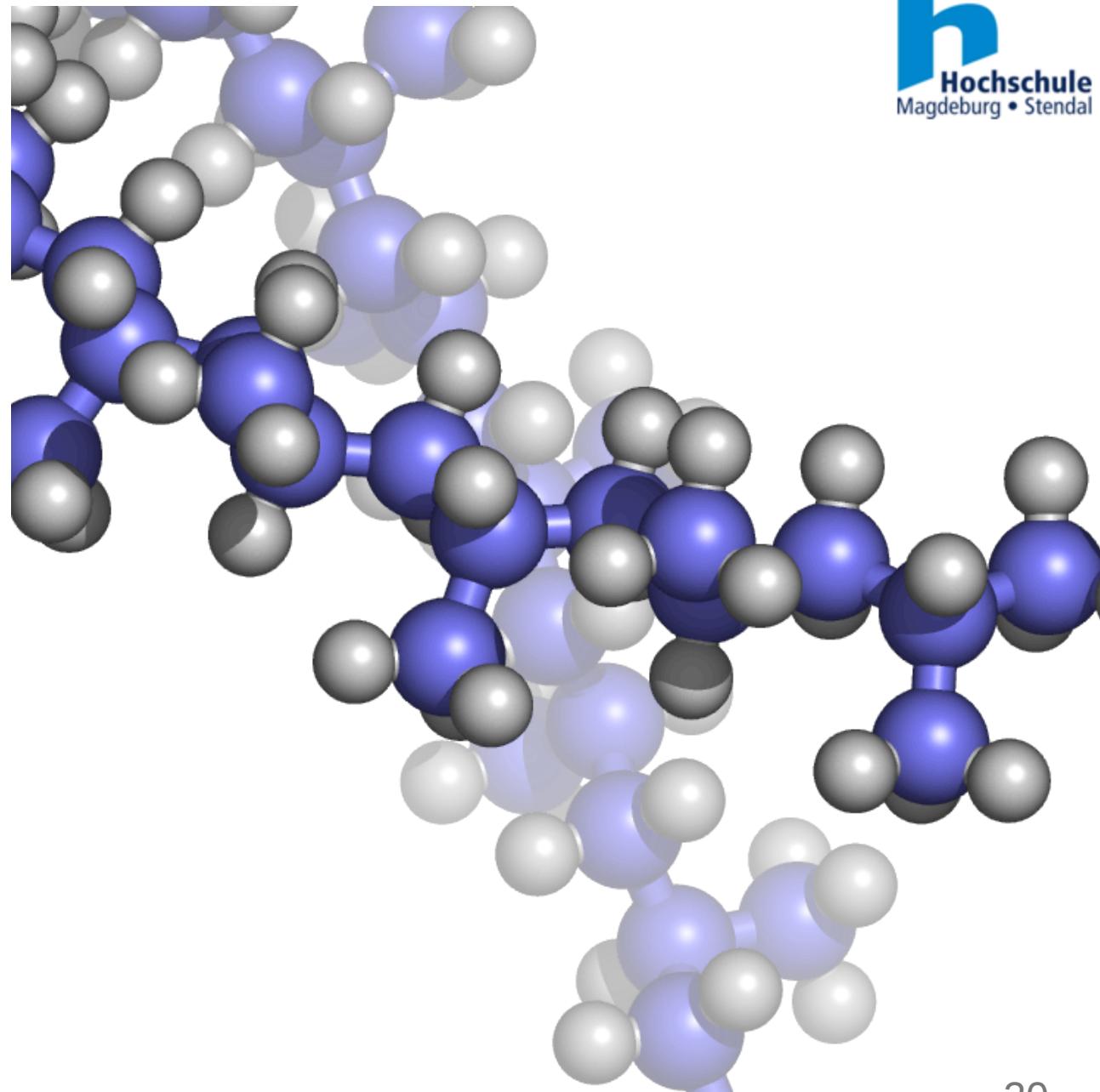
- typisch für nichtmetallisch-organische Werkstoffe
 - natürliche Materialien: Holz, Kautschuk, Leder, Fasern usw.
 - synthetische Kunststoffe: PMMA, Epoxid, usw.

Unterschied zu Metallen:

- Kovalente und Van-der-Waals-Bindungen
- Kettenmoleküle statt Kristallgitter
- Temperaturabhängiges Verhalten

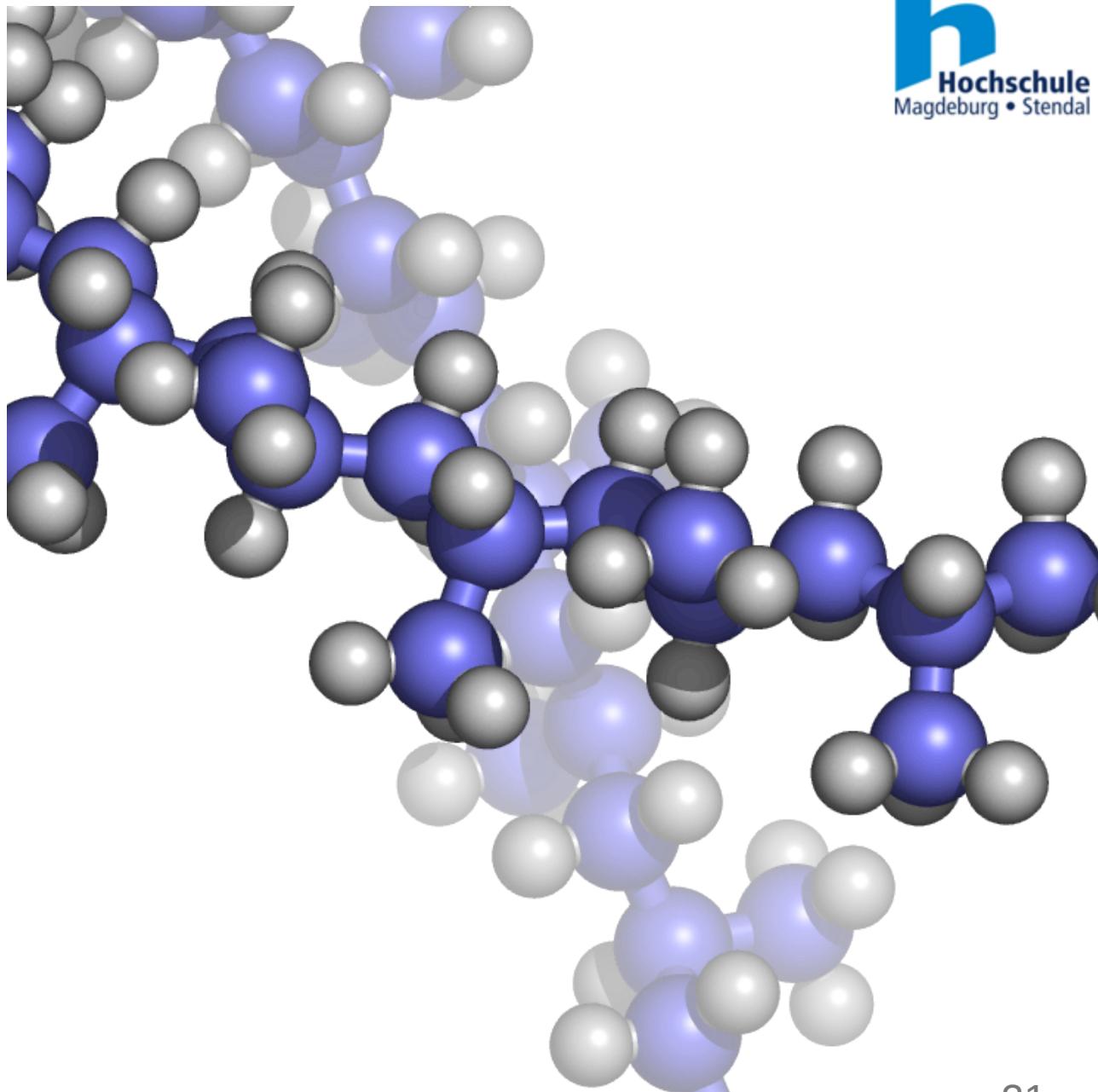


- entsteht durch Aufbaureaktionen von monomeren Grundbausteine zu Kettenmolekülen
- innerhalb der Ketten treten Atombindungen auf
- zwischen den Ketten existieren Nebenvalenzbindungen und Molekülverhakungen



Aufbau von Polymeren

- entsteht durch Aufbaureaktionen von monomeren Grundbausteine zu Kettenmolekülen
- **innerhalb der Ketten:** starke Atombindungen (kovalent)
- **zwischen den Ketten:**
schwache Nebenvalenzbindungen und Molekülverhakungen (Van-der-Waals und Wasserstoffbrückenbindung)



Polymerklassifikation

Nach Struktur:

1. Linear: Thermoplaste (PE, PP, PS)
2. Verzweigt: Thermoplaste mit reduzierter Kristallinität
3. Vernetzt: Duroplaste (Epoxid), Elastomere (Gummi)

Nach Verhalten:

- Thermoplaste: schmelzbar
- Duroplaste: nicht schmelzbar
- Elastomere: gummielastisch

Aufbaureaktion (Polymerisation)

- Es müssen freie Bindungen in den Monomeren erzeugt werden
- die Monomere "brauchen" neue Partner, um wieder energetisches Minimum zu erreichen

Polymerisationsgrad (n):

- Anzahl der Monomereinheiten
- Molmasse $M = n \times M_0$
- Typisch: $n = 1.000 - 100.000$

Eigenschaften ändern sich mit n:

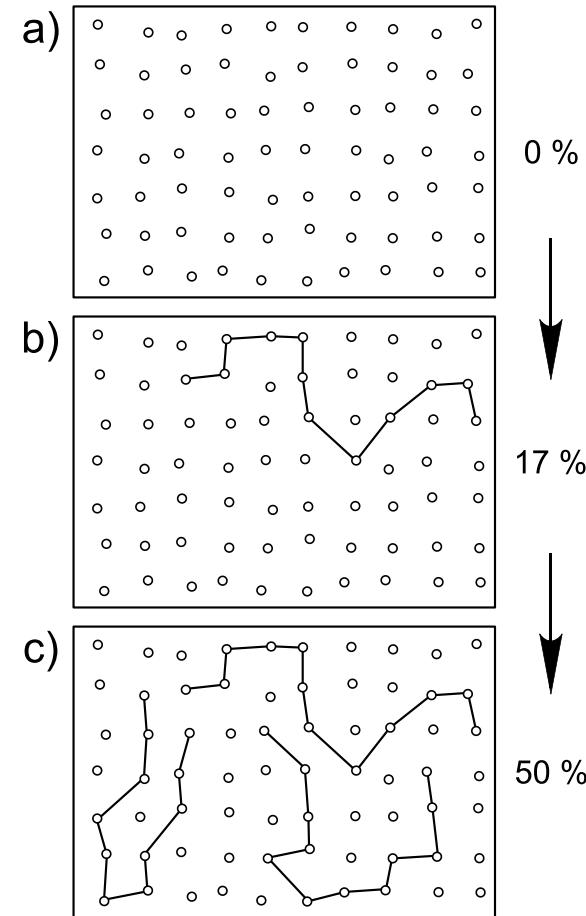
- Festigkeit ↑
- Schmelztemperatur ↑
- Löslichkeit ↓

Kettenpolymerisationen

- Aufspalten von C=C-Doppelbindungen im Monomer (katalytischer Prozess durch Druck, Temperatur, Katalysator)
- Verbindung der aufgespaltenen Monomere zu Makromolekülen

Phasen:

1. Initiierung (Radikalbildung)
2. Kettenwachstum (Addition)
3. Kettenabbruch



Beispiele:

- Polyethylen (PE): $n \text{ CH}_2=\text{CH}_2 \rightarrow (-\text{CH}_2-\text{CH}_2-)_n$
- Polypropylen (PP), Polystyrol (PS), PVC



Weitere Prozesse

Polykondensation

- Abspaltung niedermolekulare (z.B. H₂O) Reaktionsprodukte durch eine chemische Reaktion schafft freie Bindungen
- schrittweise Reaktion oder Unterbrechung führen zur Bildung von linearen, verzweigten oder vernetzten Polymeren (Thermoplaste, Elastomere oder Duromere)

Beispiele:

- Polyester (PET): Flasche, Textilfasern
- Polyamid (PA, Nylon): Textilfasern, technische Teile
- Phenolharz (Bakelit): elektrische Isolatoren

Polyaddition

- freie Bindungen entstehen durch Umlagerungen von Doppelbindungen zweier unterschiedlicher Monomermoleküle
- diese bilden dann Molekülketten
- **Keine Abspaltprodukte** (Unterschied zur Polykondensation)

Wichtigstes Beispiel:

- Polyurethan (PU): Schaumstoffe, Lacke, Elastomere

Kristallinität bei Polymeren

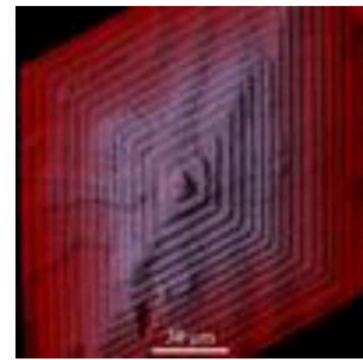
Teilkristallin:

- Geordnete (kristalline) und ungeordnete (amorphe) Bereiche
- Kristallinität: 30-80%
- Beispiele: PE, PP, PA

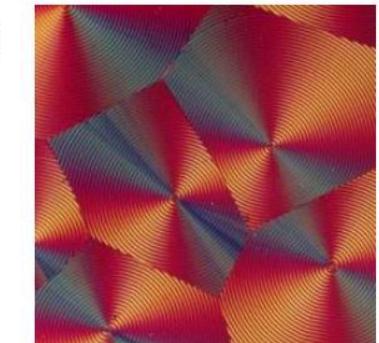
Amorph:

- Keine Ordnung
- Typisch für verzweigte und vernetzte Polymere

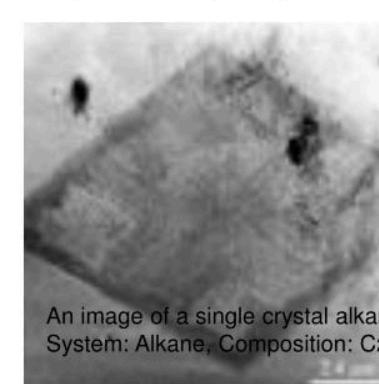
Crystallinity in Polymers



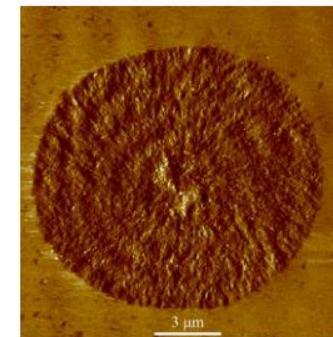
An image of an alkane crystal taken by AFM
System: Alkane, Composition: C₃₆H₇₄



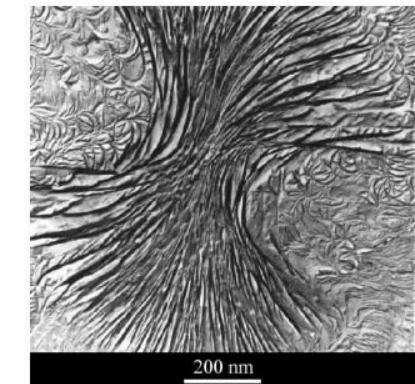
Maltese cross spherulites



An image of a single crystal alkane
System: Alkane, Composition: C₂₉H₅₉O



Single PE spherulite AFM



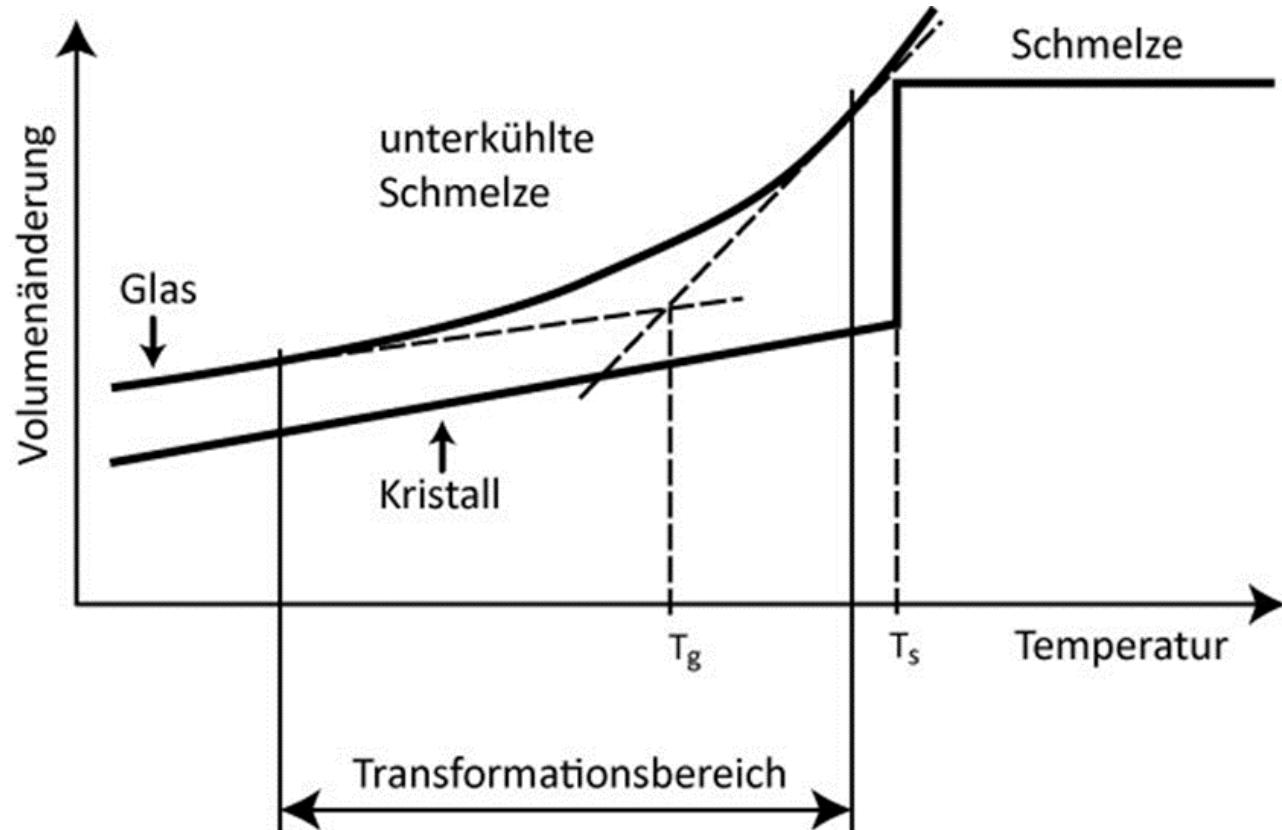
Sheaf-like arrangement of lamellae
in a blend of polyethylenes
System: Polyethylene (PE),
Composition: LPE:BPE 3:1

Einfluss auf Eigenschaften:

- Höhere Kristallinität → höhere Festigkeit, Steifigkeit
- Niedrigere Kristallinität → bessere Transparenz, Flexibilität

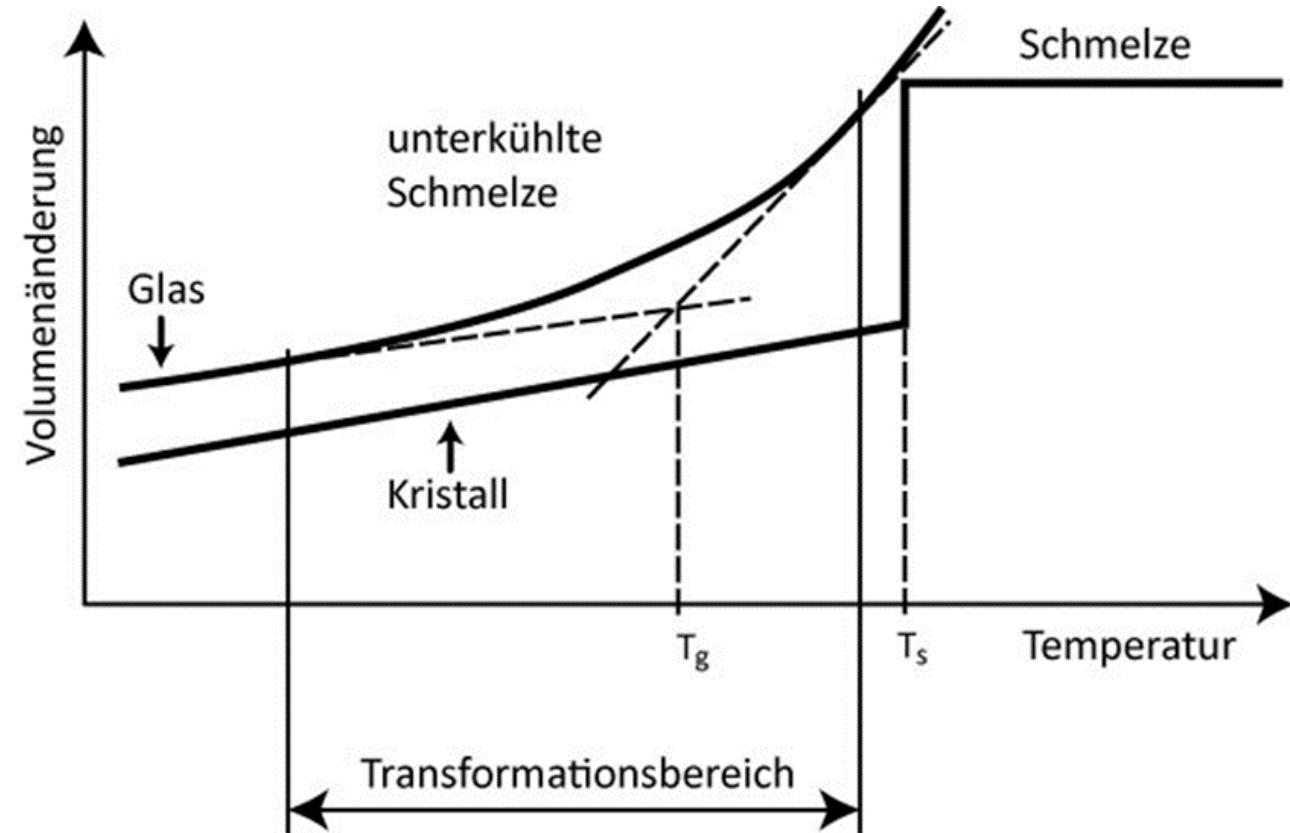
Glasig-amorphe Strukturen

- Gläser sind ein nichtmetallisch-anorganisches, vorzugsweise silikatisches Schmelzprodukt
- **nichtkristallinen, also amorphen Zustand**
- bei Glas wird die Schmelze zunächst unterkühlt und dann unterhalb der Transformationstemperatur T_g „eingefroren“



Glasübergangstemperatur T_g :

- Unterhalb: spröde, hart
- Oberhalb: geringe Härte,
verformbar



Glasbildung

Bedingungen für Glasbildung:

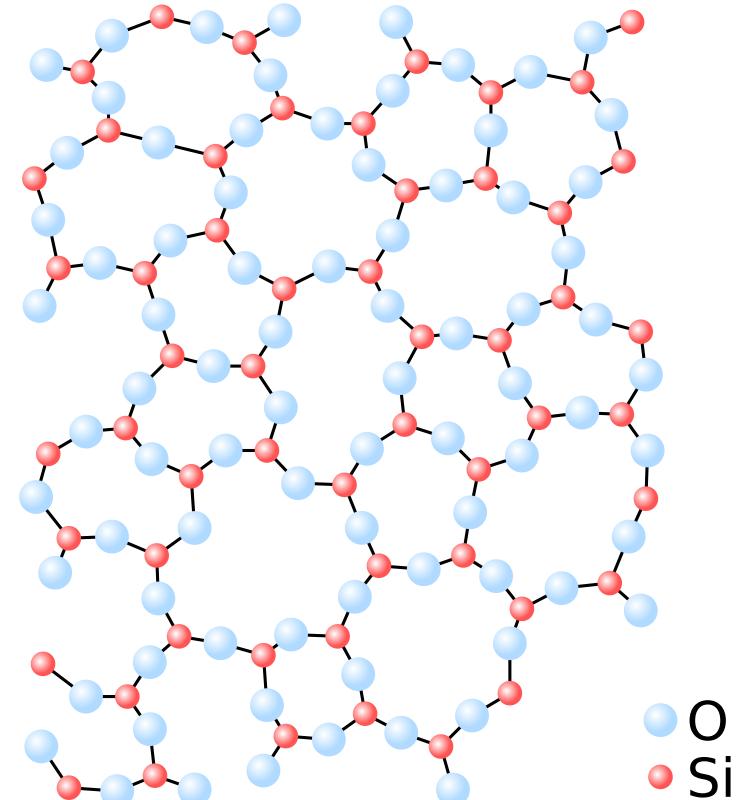
1. Schnelle Abkühlung (Unterkühlung)
2. Hohe Viskosität der Schmelze
3. Komplexe Molekülstrukturen

Technische Gläser:

- Kalk-Natron-Glas (Fenster)
- Borosilikatglas (Laborglas)
- Quarzglas (Optik)
- Metallische Gläser (amorphe Metalle)

Eigenschaften:

- Isotrop
- Transparent (oft)
- Spröde bei Raumtemperatur



Metallische Gläser

Herstellung:

- Extrem schnelle Abkühlung (10^6 K/s)
- Verhindert Kristallisation

Eigenschaften:

- Sehr hohe Festigkeit
- Keine Versetzungen
- Korrosionsbeständig
- Weichmagnetisch

Realstruktur von Kristallen

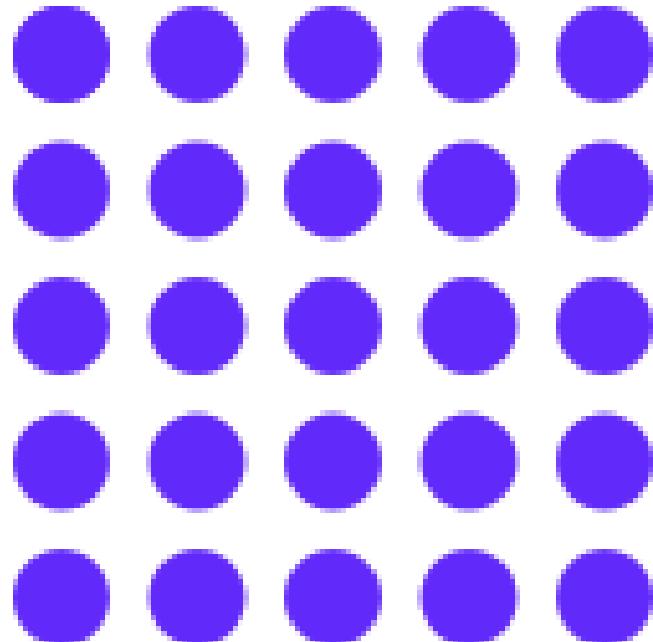
Gitterbaudefekte

- **Nulldimensionale Defekte** (Punktdefekte): Leerstellen, Zwischengitteratom, Zwischengitter-Fremdatome, Substitutions-Fremdatom
- **Eindimensionale Defekte** (Liniendefekte): Versetzungen
- **Zweidimensionale Defekte** (Flächendefekte): Stapelfehler, Korngrenzen, Subkorngrenzen, Phasengrenzen
- **Dreidimensionale Defekte**: Poren, Einschlüsse, Risse

Nulldimensionale Defekte

Arten:

- Leerstellen (Vakanz)
- Zwischengitteratome (Interstitial)
- Substitutions-Fremdatom
- Zwischengitter-Fremdatom
- Frenkel-Defekt (Leerstelle + Zwischengitteratom)
- Schottky-Defekt (Leerstellen-Paar)



Leerstellen

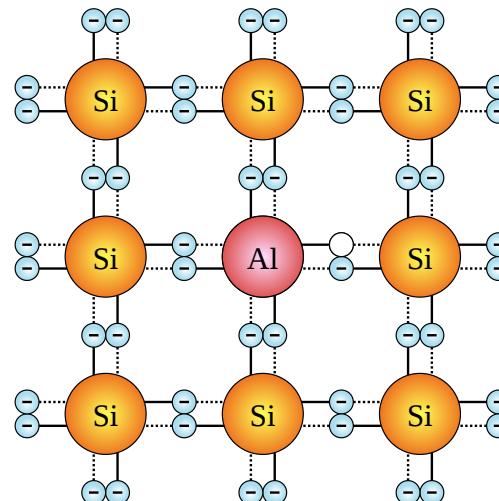
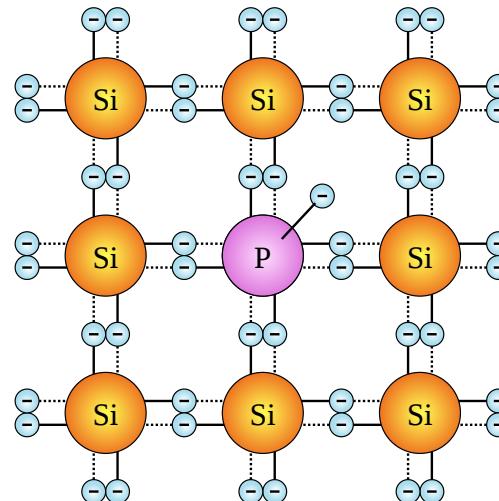
Auswirkungen:

- Diffusion ermöglichen
- Festigkeit reduzieren
- Leerstellenwanderung

Fremdatome

Nutzen:

- Dotierung im Halbleiter
 - gezielte Manipulation der elektrischen Leitfähigkeit durch Einbringung zusätzlicher Atome



- Zwischengitter und Substitutionsfremdatom
 - Erhöhung der Festigkeit durch natürlichen "Rissstopp" oder lokal einfacheren Versatz und lokale Reduktion der Spannungen
 - Größe und chemische Ähnlichkeit definiert Substitution oder Zwischengitter

Mischkristallverfestigung:

- Atomgrößenunterschied erzeugt Gitterverzerrungen
- Behinderung der Versetzungsbewegung
- Festigkeitssteigerung proportional zu Wurzel der Konzentration

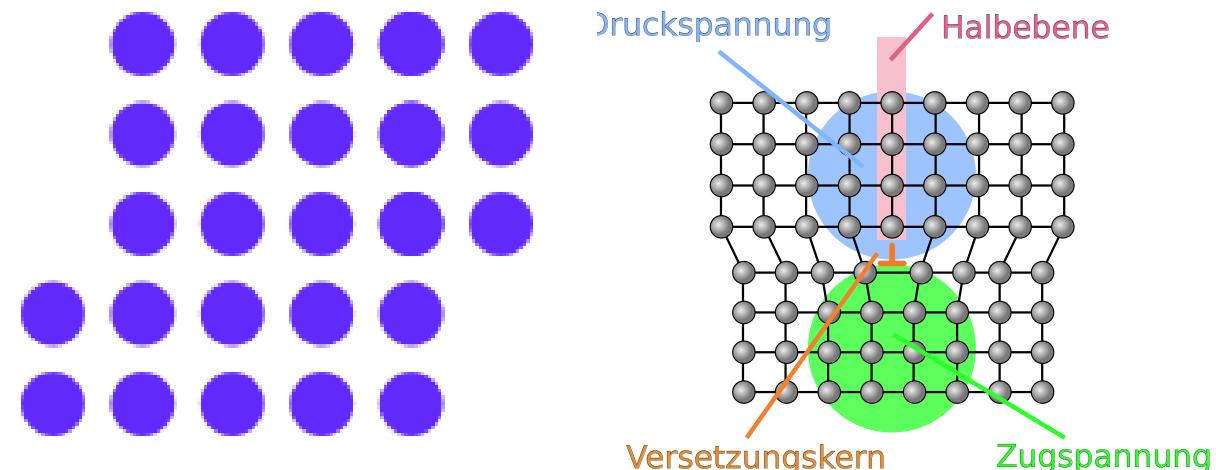
Versetzungen

Versetzungen entstehen

- beim Kristallwachstum
- aufgrund von Eigenspannungen
- durch plastische Verformungen

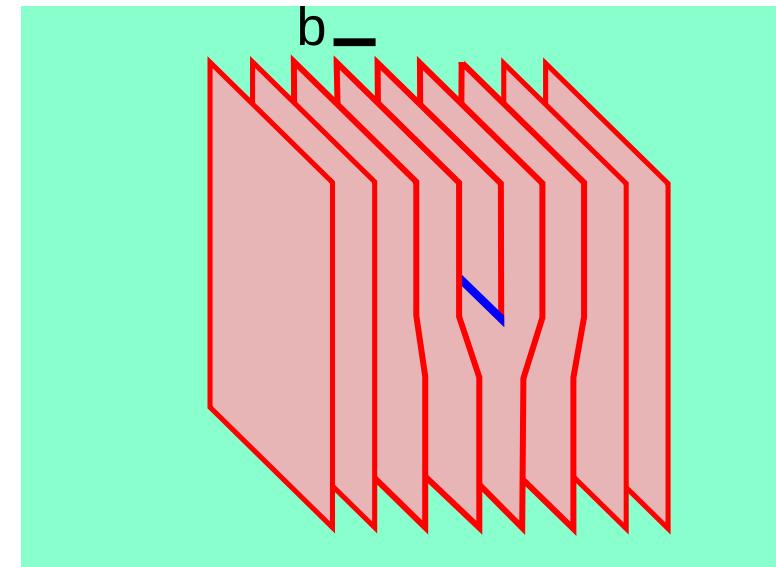
Versetzungsdichte:

- Geglühter Kristall: $10^6 - 10^8 \text{ cm}^{-2}$
- Verformter Kristall: $10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$



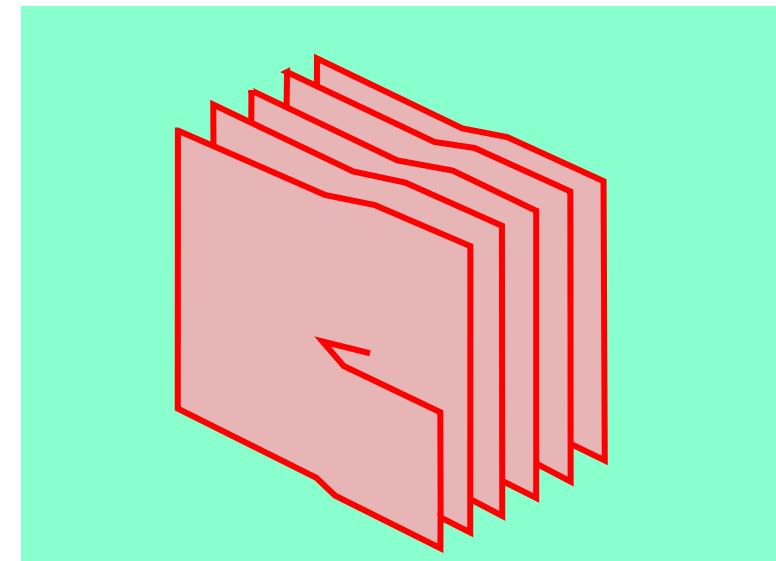
Stufenversetzung

- Extra-Halbebene im Kristall
- Energie: $E \approx \frac{3}{4}Gb^2$
- Burgersvektor \perp Versetzungsleitung



Schraubenversetzungen

- Spiralförmige Gitterverzerrung
- Energie: $E \approx \frac{1}{2}Gb^2$
- Burgersvektor \parallel Versetzungsleitung



Versetzungsbewegung

Gleitbewegung:

- Versetzung bewegt sich in Gleitebene
- Niedrige erforderliche Schubspannung
- Hauptmechanismus der plastischen Verformung

Klettern (Climb):

- Versetzung verlässt Gleitebene
- Erfordert Diffusion von Leerstellen
- Nur bei hohen Temperaturen
- Wichtig beim Kriechen

Quergleiten (Cross-slip):

- Schraubenversetzung wechselt Gleitebene
- Ermöglicht dreidimensionale Verformung

Versetzungswchselwirkungen

Versetzungsaufstau:

- Versetzungen stauen sich vor Hindernissen
- Spannungskonzentration
- Kann zu Rissbildung führen

Versetzungsverflechtung:

- Versetzungen blockieren sich gegenseitig
- Verfestigungsmechanismus
- "Wälder" von Versetzungen

Versetzungreaktionen:

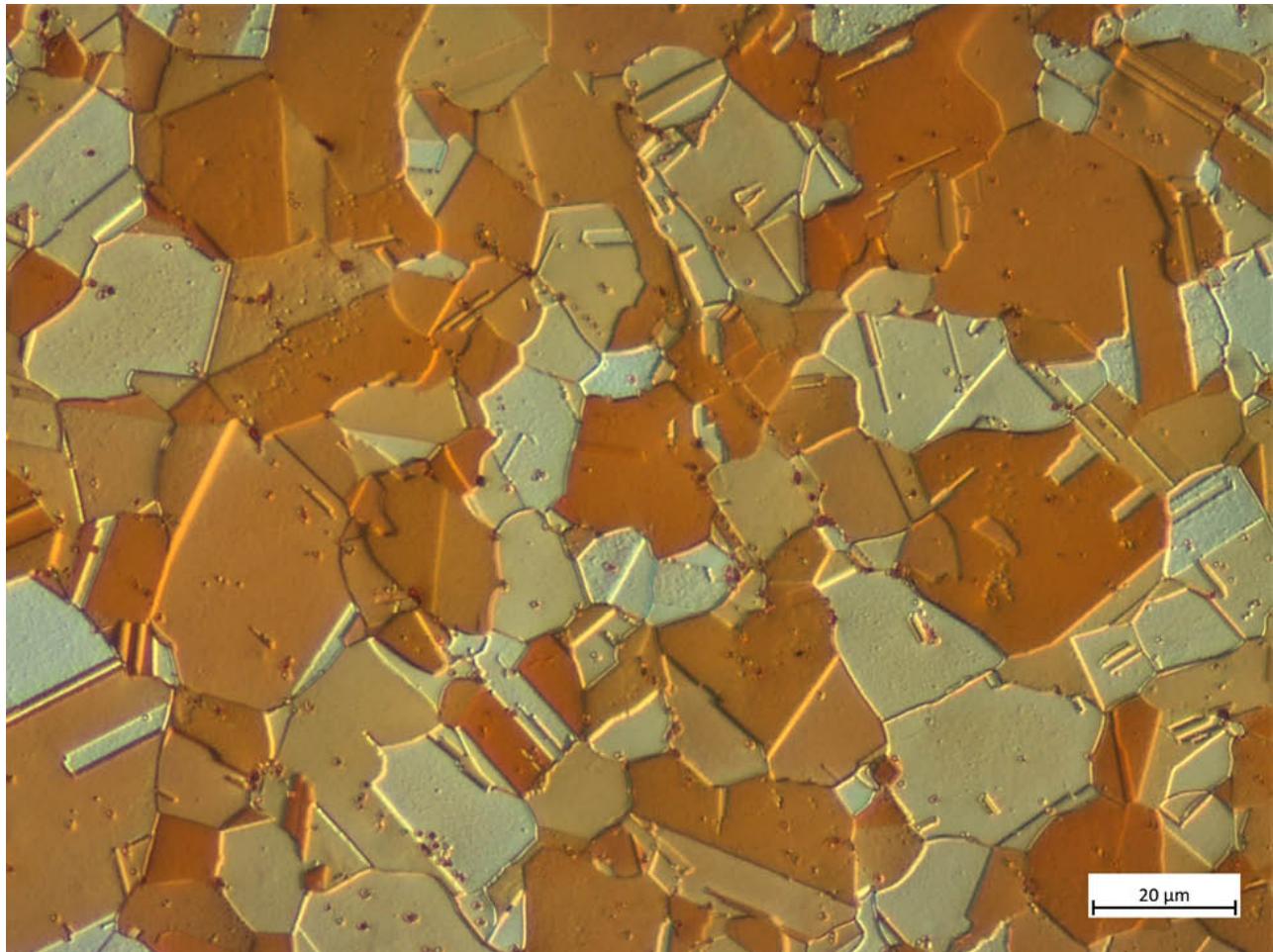
- Zwei Versetzungen können verschmelzen
- Neue Versetzung mit anderem Burgersvektor
- Frank-Read-Quelle: Versetzungsmultiplikation

Defektübersicht

Zweidimensionale Fehlstellen - Korngrenzen

- Korngrenzen
- Phasengrenzen
- Subkorngrenzen

Skript



Korngrenzen:

- Großwinkelkorngrenzen ($\theta > 15^\circ$)
- Kleinwinkelkorngrenzen ($\theta < 15^\circ$)
- Spezielle Korngrenzen (Zwillingsgrenzen)

Phasengrenzen:

- Kohärente Grenzen (epitaktisch)
- Semi-kohärente Grenzen (mit Versetzungen)
- Inkohärente Grenzen (ungeordnet)

Subkorngrenzen:

- Anordnung von Versetzungen
- Entstehen bei Erholung

Korngrenzeigenschaften

Strukturelle Merkmale:

- Höhere Energie als Kristallinneres
- Reduzierte Atomdichte
- Erhöhte chemische Aktivität

Einfluss auf Eigenschaften:

- Diffusion entlang Korngrenzen schneller
- Bevorzugte Korrosionsangriffsstellen
- Behinderung der Versetzungsbewegung (Hall-Petch)
- Ausgangspunkt für Rekristallisation

Große Körner (grobes Gefüge)

- **Niedrigere Festigkeit**
 - Wenige Korngrenzen als Versetzungsbarrieren
 - Lange freie Weglängen für Versetzungen
- **Höhere Duktilität**
 - Mehr Raum für Versetzungsbewegung
 - Bessere Verformbarkeit

Hochtemperaturverhalten

- **Besseres Kriechverhalten**
 - Weniger Korngrenzendiffusion
 - Stabiler bei erhöhten Temperaturen

Anwendungen

- Turbinenschaufeln (Hochtemperatur)
- Wenn Duktilität wichtiger als Festigkeit
- Einkristalle für spezielle Anwendungen

Kleine Körner (feines Gefüge)

- **Höhere Festigkeit**
 - Viele Korngrenzen = viele Barrieren
- **Höhere Härte**
 - Widerstand gegen lokale Verformung
- **Gute Zähigkeit**
 - Rissbremsung an Korngrenzen

Verformungsverhalten

- **Homogenere Verformung**
 - Viele kleine Bereiche aktiv
- **Leicht reduzierte Duktilität**
 - Aber oft akzeptabel

Anwendungen

- Hochfeste Stähle (Automobilbau)
- Strukturbauenteile
- Überall wo Festigkeit + Zähigkeit gefragt ist

Plastizität

Gut oder Schlecht



Beispiele

Hohe Plastizität:

- Knete
- feuchter Ton
- Metalle und Metalllegierungen mit geeignetem Atomgitter:
 - glühender Stahl beim Schmieden
 - Kaltumformung von Blechen

Geringe Plastizität:

- Gummi
- Keramik
- Faserkunststoffverbunde (Epoxid-Glasfaser oder Epoxid-Kohlefaser)

Vorteile der Plastizität:

- Umformbarkeit (Fertigung)
- Energieabsorption (Crash)
- Zähigkeit (keine spontane Rissausbreitung)
- Spannungsabbau

Nachteile der Plastizität:

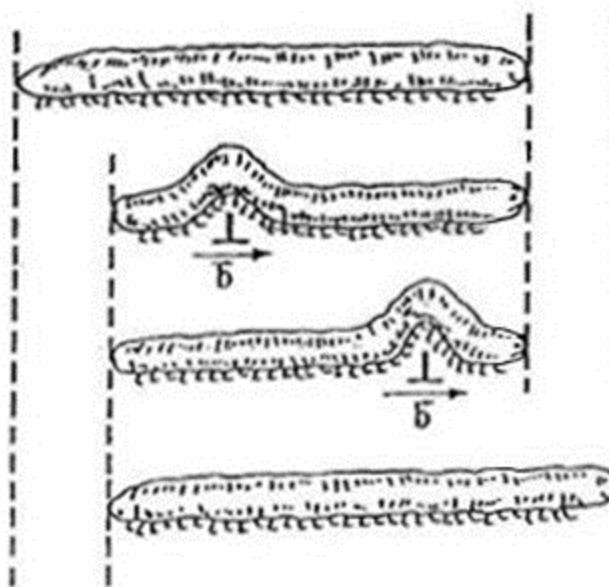
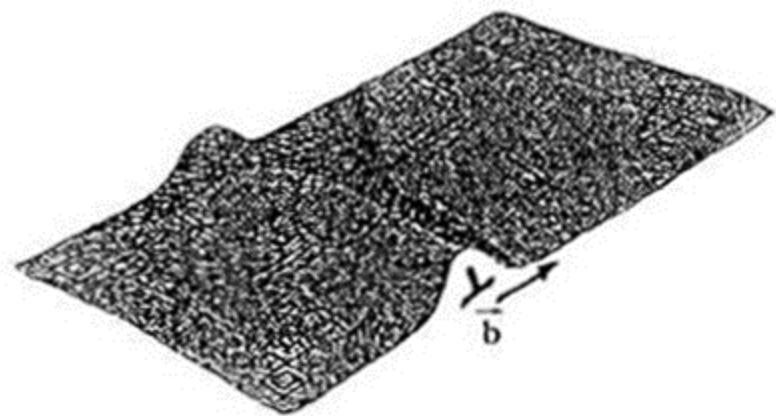
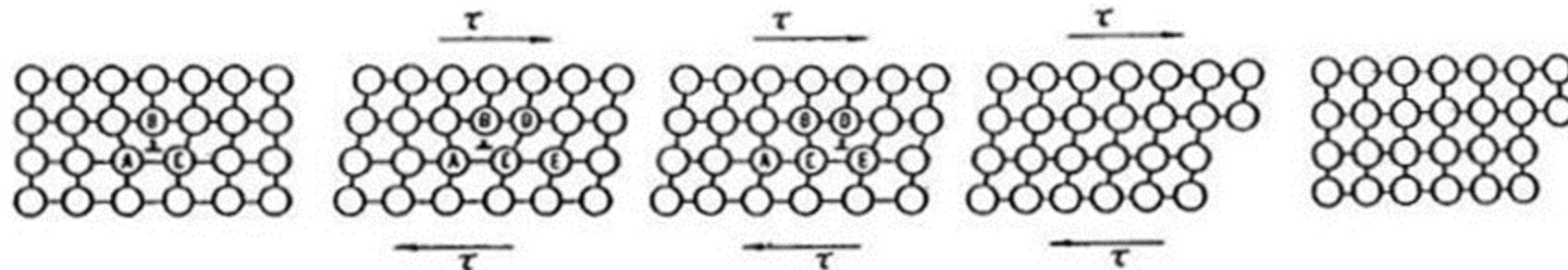
- Dimensionsänderung
- Kriechverformung
- Bauteilver sagen bei Überlast
- Ermüdung

Plastizität - Einkristall

Die plastische Verformung eines Kristalls vollzieht sich im Wesentlichen durch Abgleiten von Atomschichten entlang bestimmter kristallographischer Ebenen und Richtungen unter Einwirken von Schubspannungen.

- Gleitsystem besteht aus Gleitebene und Gleitrichtung
- kritische Schubspannung ($\tau_{K_r} \approx G/10$ - Abschätzung oder theoretische Schubfestigkeit)
- Realität um Faktor ~100 niedriger durch Versetzungen

Bild



Plastische Verformung des polykristallinen Werkstoffs

- Mikro- und Makroplastizität
 - Plastische Verformung beginnt bei "ungünstigen" Orientierungen
- Korngrenzen
 - Barriere für Versetzungsbewegung
 - bei hohen Temperaturen können Korngrenzen gleiten (Kriechen)
 - gezielte Fertigung kann durch Korngrenzen Zähigkeit erhöhen
- Heterogenität
 - Mehrphasigkeit
 - inhomogene Verteilung der Spannungen und Verformungen
- Anisotropie

Polykristall Plastizität

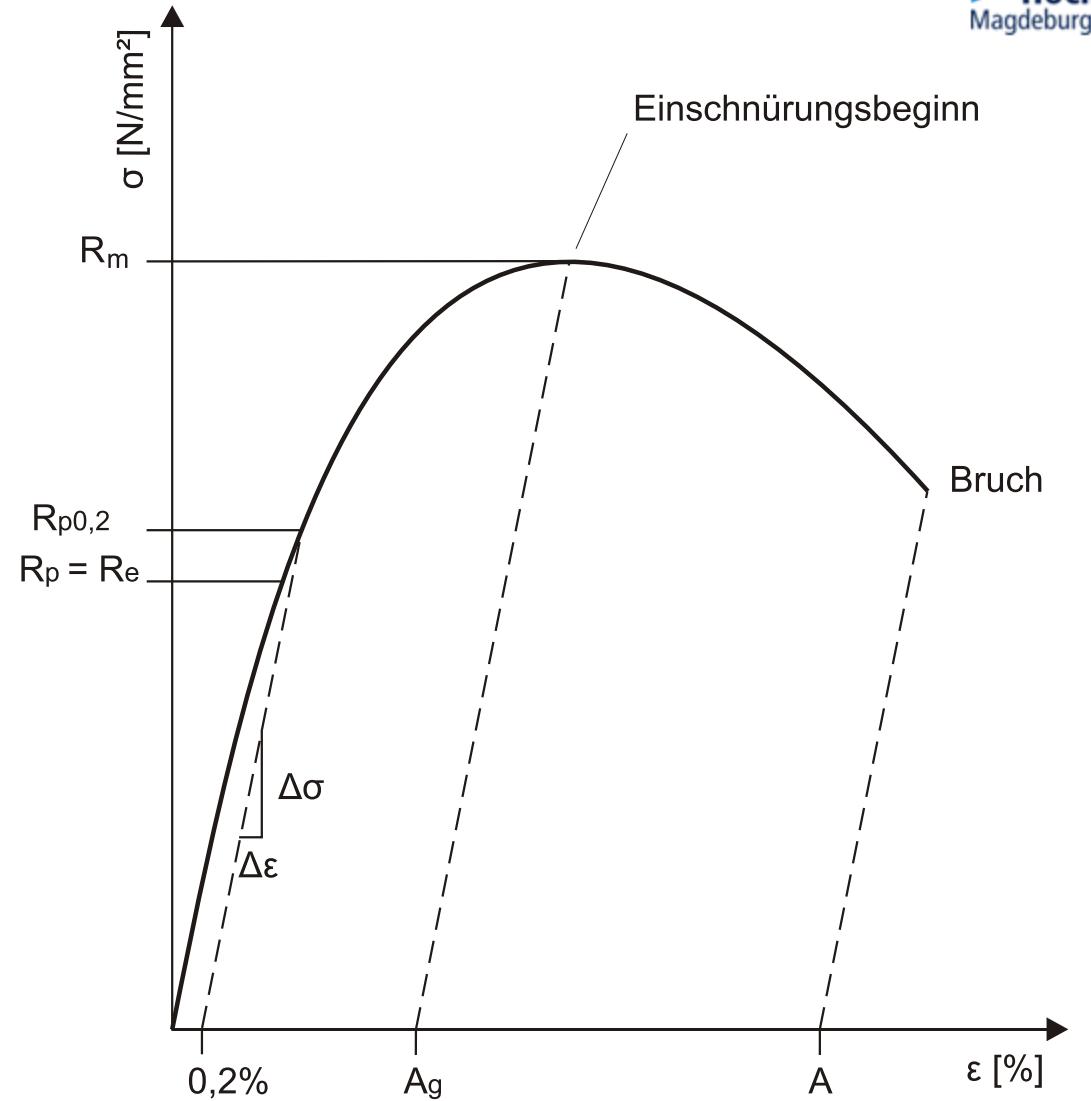
Beispiel aus einer Simulation

Streckgrenze

Charakteristische Punkte:

- R_m - Zugfestigkeit (Maximum)
- R_e - Streckgrenze
(Elastizitätsgrenze bei linearem Verlauf)
- $R_{p0,2}$ - Dehngrenze (0.2% bleibende Dehnung)
- A - Bruchdehnung (in %)
- Z - Brucheinschnürung (in %)

[Beispielvideo](#)



Streckgrenze und Dehngrenze

Streckgrenze Re:

- Bei Werkstoffen mit ausgeprägter Streckgrenze
- Charakteristisch für niedrig legierten Stahl
- Markiert Übergang elastisch → plastisch

Dehngrenze Rp0.2:

- Ersatzstreckgrenze bei Werkstoffen ohne ausgeprägte Streckgrenze
- Belastung bis 0.2% bleibende Dehnung, dann Entlastung
- Standard für Aluminiumlegierungen, hochlegierte Stähle

Datenblatt Stahl

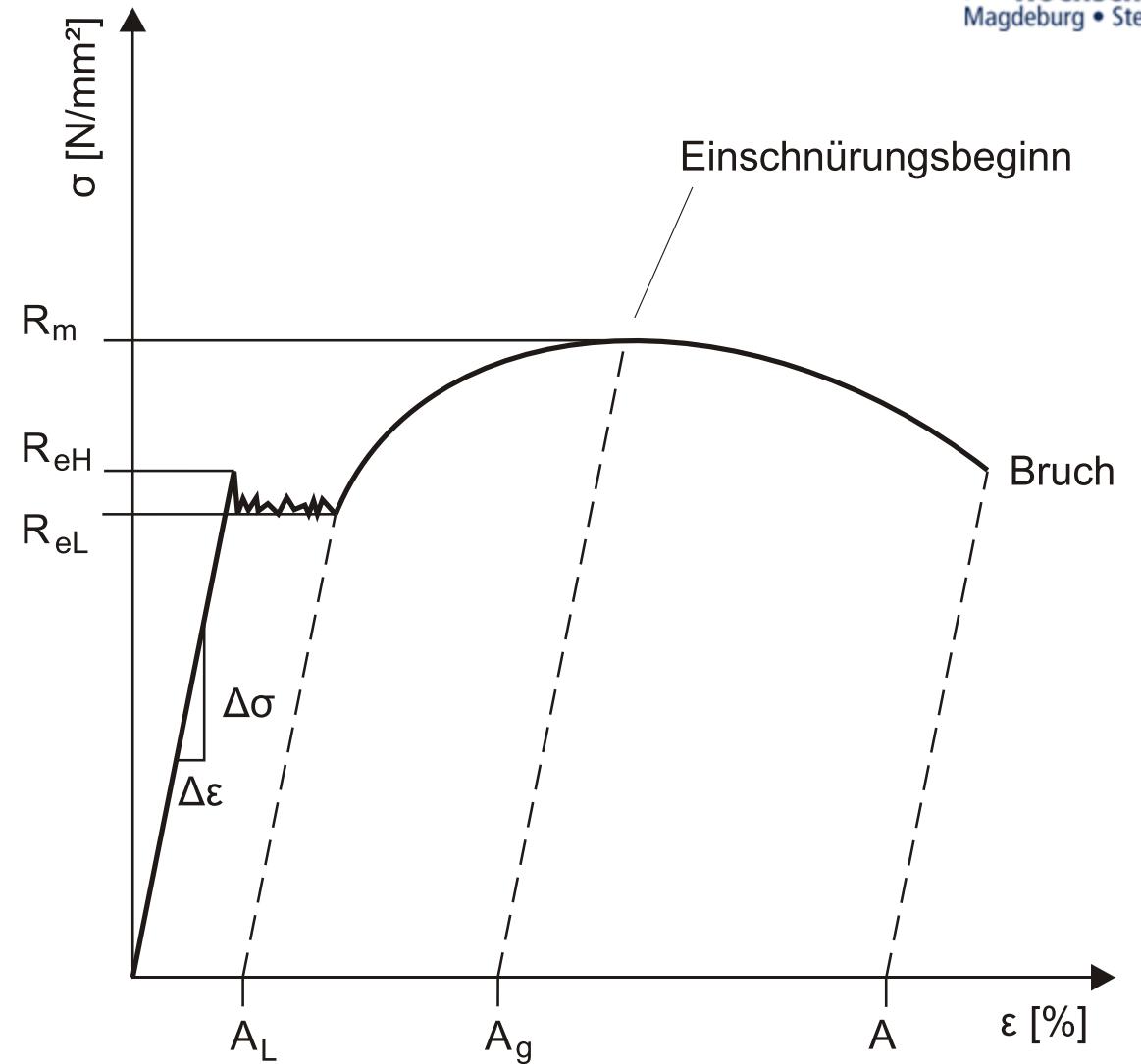
Streckgrenzenphänomen

Obere und untere Streckgrenze:

- R_{eH} - obere Streckgrenze (Maximum)
- R_{eL} - untere Streckgrenze (Plateau)

Lüdersbereich:

- Gezackter Bereich nach Streckgrenze
- Lüdersbänder wandern durch Probe
- Ausscheidungen blockieren Vorgesetzungen



Plastizität - Umformen

Massivumformung:

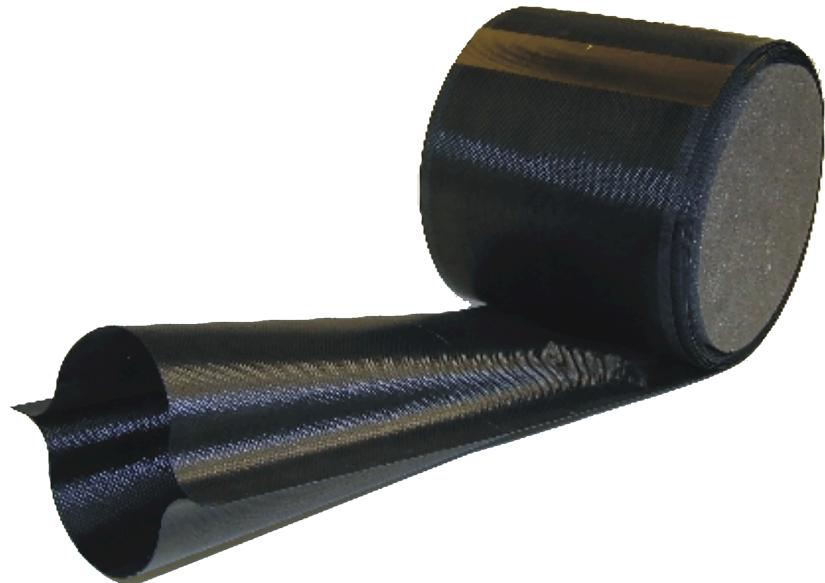
- Schmieden, Pressen, Walzen, **Tiefziehen Prinzip**
- Große Formänderungen
- Kornverfeinerung

Blechumformung:

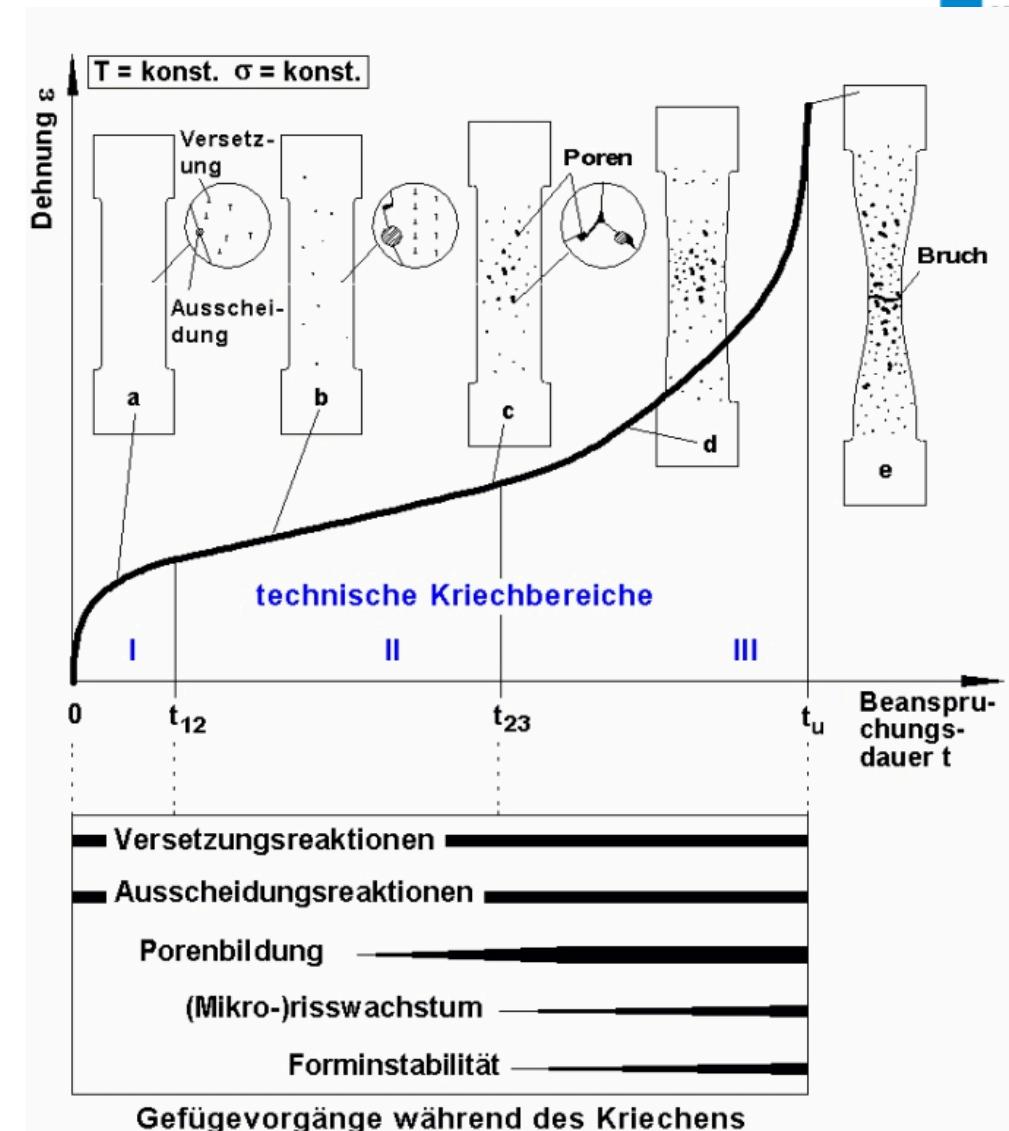
- Biegen, Streckziehen, **Tiefziehen**
- Begrenzte Formänderung
- Anisotropie wichtig

Kriechen

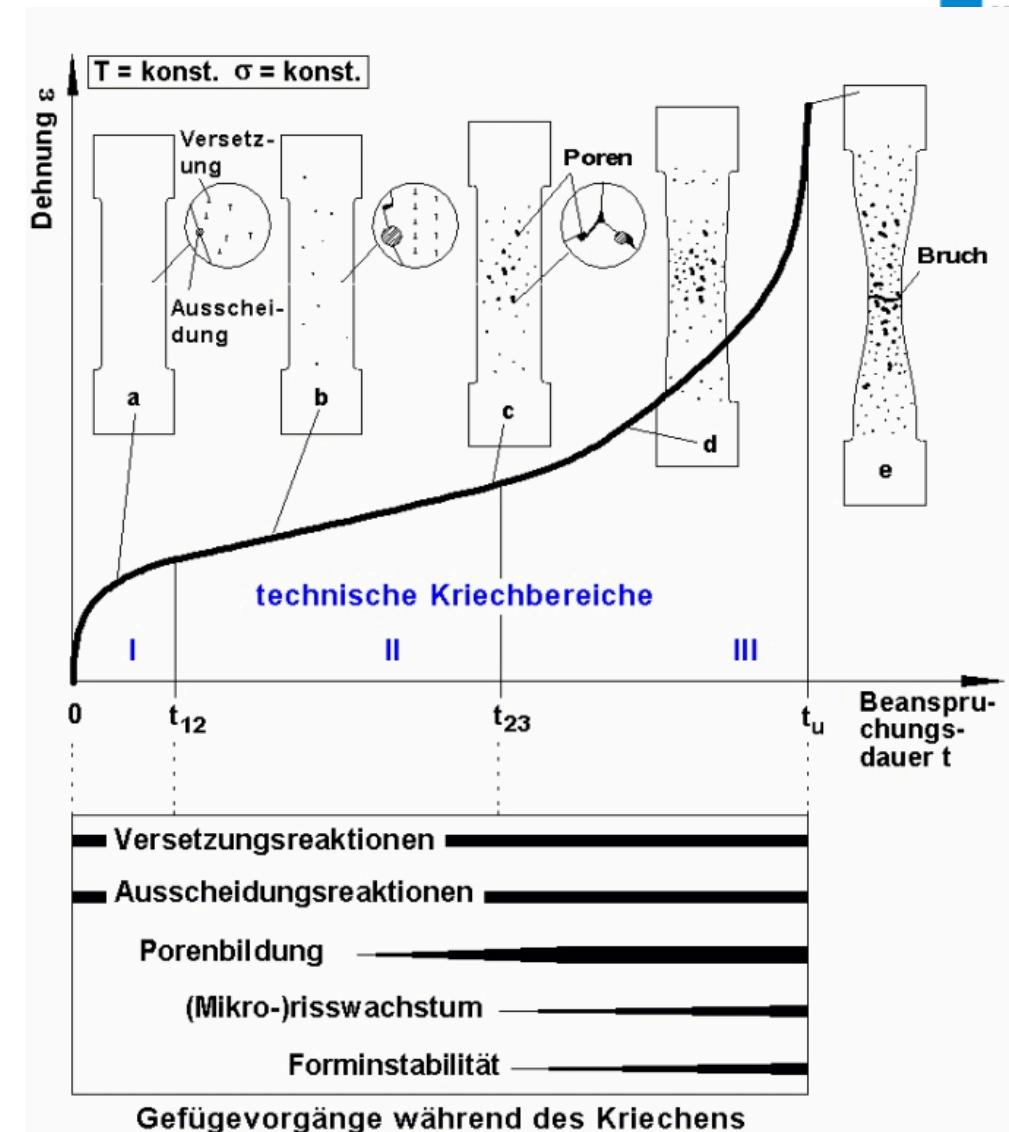
- Zeitabhängige Verformung bei konstanter Belastung
- Beispiel [entfallbare Raumfahrtstrukturen](#)



- findet bei Metallen oberhalb einer Übergangstemperatur statt ($0.3 - 0.4 \cdot T_S$)
- auch bei geringen mechanischen Spannungen unterhalb der Streckgrenze R_e findet eine irreversible plastische Verformung, die langsam, aber stetig voranschreitet statt



- temperatur-, spannungs-, zeit- und werkstoffabhängig
- Ursache:
Versetzungsbewegungen,
Leerstellendiffusion,
Korngrenzengleiten,
Korngrenzendiffusion



1. Primärkriechen:

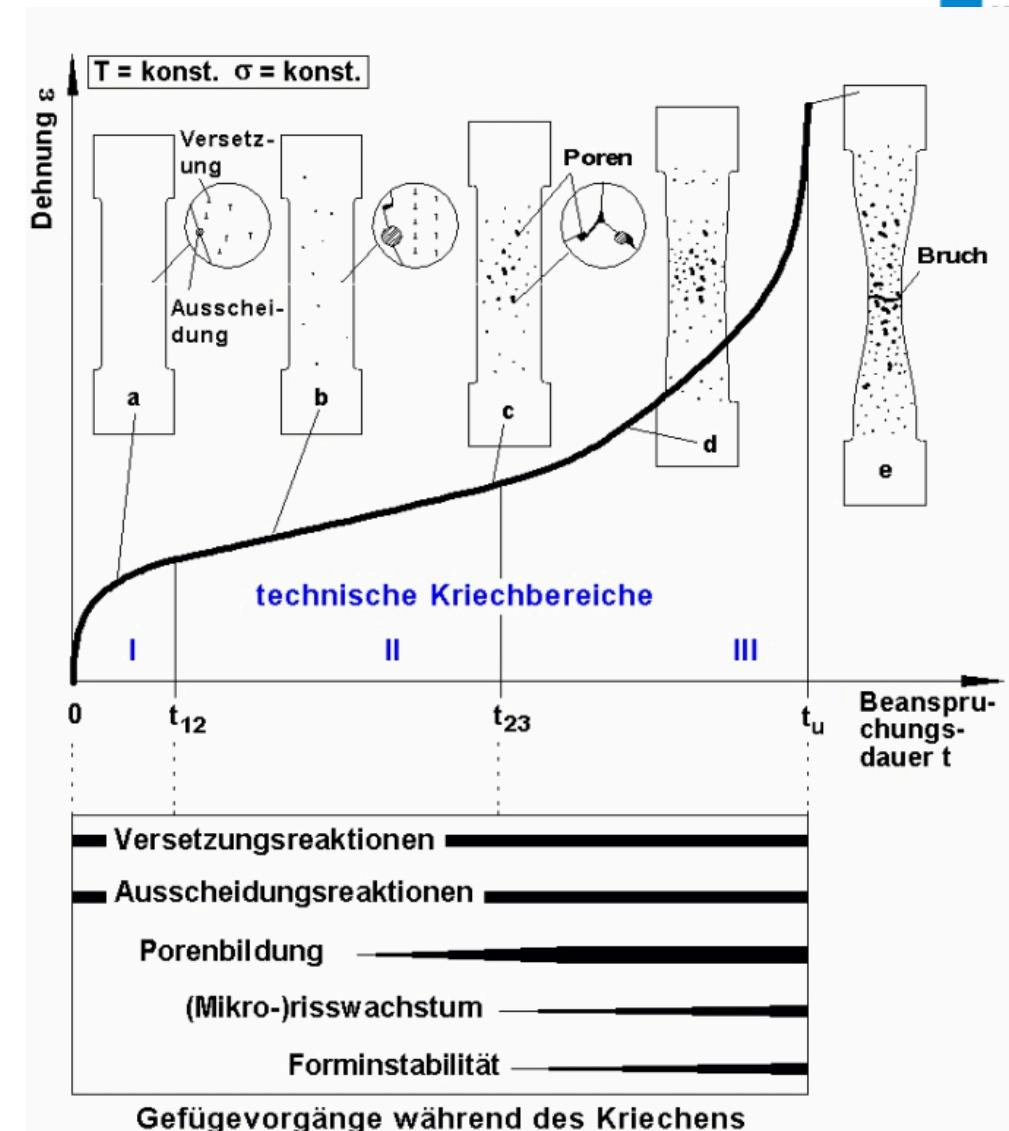
- Abnehmende Kriechrate
- Verfestigung dominiert

2. Sekundärkriechen:

- Konstante Kriechrate (stationär)
- Gleichgewicht: Verfestigung - Erholung

3. Tertiärkriechen:

- Zunehmende Kriechrate
- Schädigung (Poren, Risse)
- Führt zum Bruch



Kriechen in Kunststoffen

- bestehen aus Molekülketten
- diese gleiten bzw. entknäueln sich diese unter äußerer
- Sekundärbindungen zwischen den Makromolekülen werden neu gebildet und Deformation bleibt erhalten

Zusammenfassung

Kernpunkte:

1. Kristallstrukturen bestimmen grundlegende Eigenschaften
2. Realstrukturen enthalten immer Defekte
3. Defekte ermöglichen plastische Verformung
4. Versetzungen sind Träger der Plastizität
5. Korngröße beeinflusst Festigkeit (Hall-Petch)
6. Temperatur aktiviert zusätzliche Mechanismen (Kriechen)
7. Struktur-Eigenschafts-Beziehungen sind fundamental