

# Der Einfluß der Gitterfehler auf die mechanischen Eigenschaften der Metalle

## Einführung

Das gewählte Thema ist ein gutes Beispiel zur Verdeutlichung dessen, was man unter Werkstoffwissenschaften (Werkstofftechnik) versteht, nämlich das Zurückführen der makroskopischen Eigenschaften eines Werkstoffes auf seine mikroskopische und submikroskopische Struktur. Wenn man diese Zusammenhänge versteht, ist man in der Lage Werkstoffeigenschaften gezielt zu manipulieren.

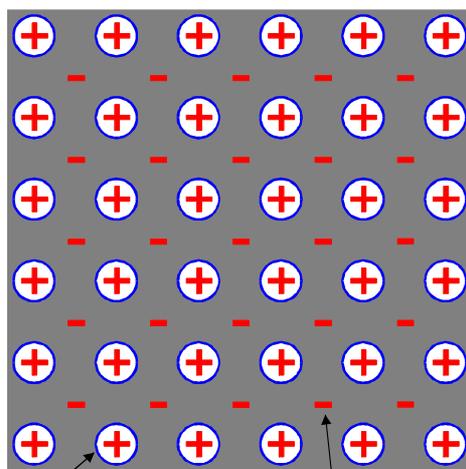
Die folgende Betrachtung bezieht sich auf metallische Werkstoffe.

Die mechanischen und physikalischen Eigenschaften der Metalle hängen im wesentlichen von 3 Merkmalen ihres Aufbaus ab:

- der Metallbindung
- dem Gitteraufbau
- den Gitterfehlern

Auf atomarer Ebene ist zunächst die chemische Bindung der Metallatome (besser Ionenrümpfe) zu nennen, die sog. Metallbindung.

Bekannterweise sind aus Stabilitätsgründen alle Verbindungsbildungen darauf angelegt, die Edelgaskonfiguration, d.h. 8 Elektronen auf der Außenschale zu erreichen. Bei 2 der starken Bindungen (Ionen- und Elektronenpaar-Bindung) wird dies durch Zuordnung von Elektronen zu 2 ganz bestimmten Atomen erreicht, an die die Elektronen dann fest gebunden sind.



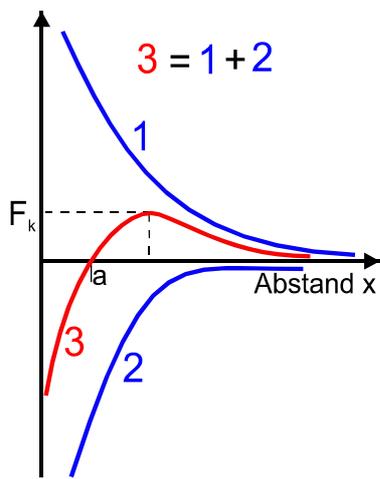
Atomrümpfe (Kationen) Elektronen "Gas"

Bei den Metallen ist dies ganz anders. Da alle Metalle Zwischengruppenelemente sind oder in den beiden ersten Gruppen des PSE stehen (außer Al), haben sie maximal nur 2 Elektronen auf ihrer äußersten Schale. Diese werden von den Atomen an die Gesamtheit des Metallgitters abgegeben. Es erfolgt keine feste Zuordnung, so daß die Elektronen zwischen den positiven Ionenrümpfen relativ frei beweglich sind; man spricht vom „Elektronengas“, s. Abb. 1.

Abb. 1: Metallbindung (schematische Darstellung)

Dieses ist als Ursache für die gute elektrische- und Wärme-Leitfähigkeit der Metalle anzusehen aber auch mit für den Gitter(Kristall-)aufbau der Metalle und deren Umformbarkeit mitverantwortlich.

Die Ausbildung eines regelmäßigen Kristallgitters kommt durch die Wechselwirkung der Ionenrümpfe mit den Elektronen und untereinander zustande. Es wirken anziehende und abstoßende Kräfte, s. Abb. 2, deren Überlagerung einen Nulldurchgang im Abstand  $a$  der einzelnen Ionenrümpfe ergibt. In diesem Abstand spüren letztere keine Kräfte auf sich einwirken und ordnen sich daher beim Erstarren aus der Schmelze freiwillig zu einem 3-dimensionalen Kristallgitter an, s. Abb. 3.



- 1: Anziehung:  
 $F \sim 1/x^6$   
 2: Abstoßung:  
 $F \sim 1/x^{12}$

Abb. 2: Kräfte in der metallischen Bindung

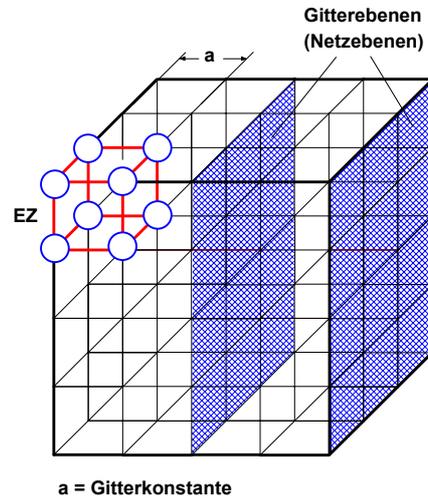


Abb. 3: Aufbau eines idealen einfachen kubischen Raumgitters

Die kleinste geometrische Untereinheit wird Elementarzelle (EZ) genannt. Man erkennt außerdem in Abb.3, daß sich durch den Gitteraufbau sog. Netzebenen ausbilden.

Abgesehen davon, daß es eine Reihe unterschiedlicher Elementarzellen gibt (z.B. kubisch flächenzentriert, kubisch raumzentriert, hexagonal etc.) wäre ohne das Vorhandensein von Gitterfehlern an dieser Stelle der Aufbau der Metalle abgeschlossen und damit ihre Eigenschaften festgelegt.

In Realkristallen sind jedoch, außer in Sonderfällen, immer eine Reihe von Gitterfehlern präsent, so daß eine reale Netzebene so aussehen könnte, wie in Abb. 4 dargestellt.

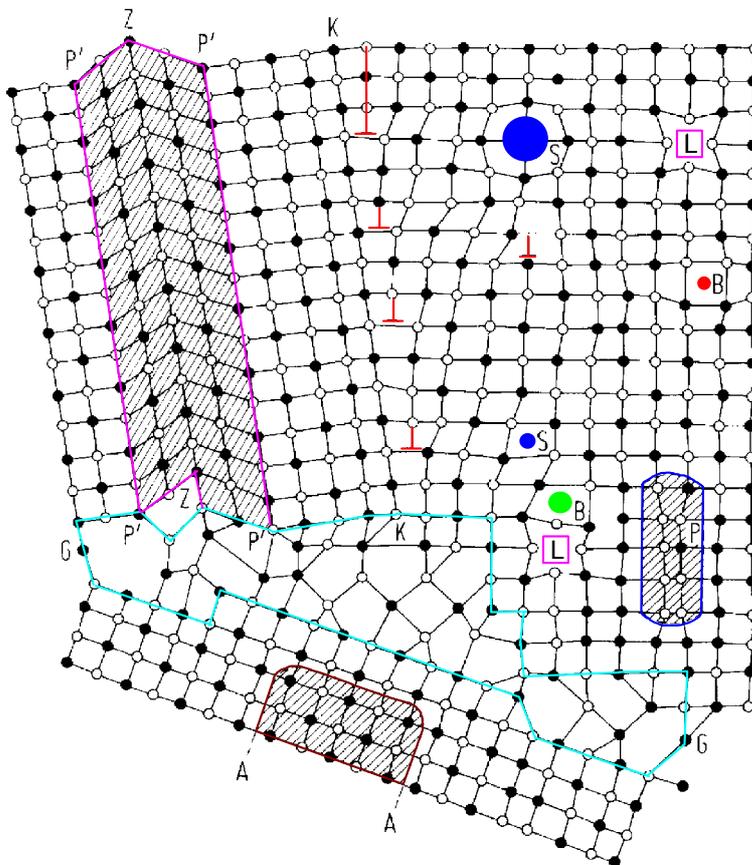


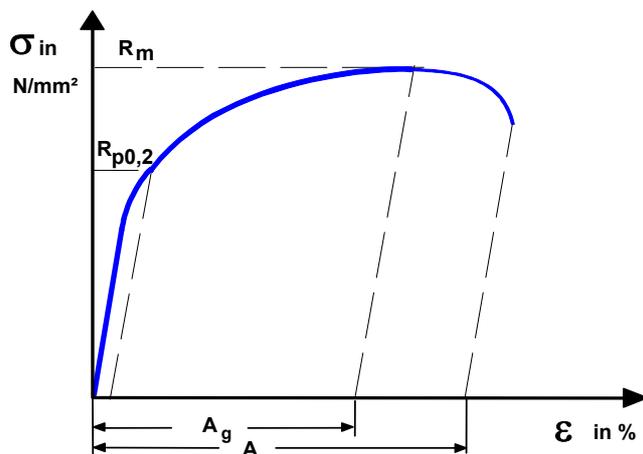
Abb. 4:  
 Schematische Darstellung möglicher Gitterfehler<sup>1)</sup>  
 L = Leerstelle  
 B = Zwischengitteratom  
 S = Fremdatom  
 A = Antiphasengrenze  
 Z = Zwillingsgrenze  
 K = Kleinwinkelkorngrenze  
 G = Großwinkelkorngrenze  
 P = kohärente Phasengrenze (Entmischung)  
 P = kohärente Phasengrenze (Schierung)  
 ⊥ = Versetzung

Diese Gitterfehler stellen die einzige Möglichkeit dar, die Eigenschaften eines metallischen Werkstoffes zu manipulieren, d.h. sie sind nicht als „Fehler“, sondern als Instrument für den Werkstoffwissenschaftler zu verstehen.

Ich möchte im Folgenden auf einige Gitterfehler, ihre Wirkung auf die Festigkeit und ihre Anwendung bei technischen Werkstoffen eingehen.

Festigkeit kann man definieren als Widerstand gegen plastische Verformung. Träger der plastischen Verformung bei Metallen sind Gitterfehler, die sog. Versetzungen, s.u. Plastische Verformung bedeutet Bewegung (Gleiten) von Versetzungen. Erhöhung der Festigkeit ist damit gleichzusetzen mit Blockade der Versetzungen.

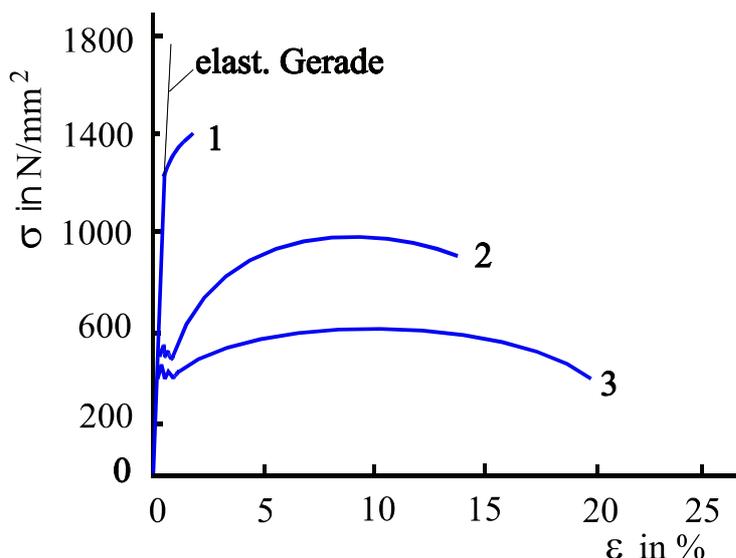
Bei metallischen Werkstoffen wird die Festigkeit im Temperaturbereich bis ca.  $0,4 T_S$  ( $T_S$  = Schmelztemperatur) mit dem Zugversuch ermittelt. Dabei wird eine genormte Probe in eine Zerreißmaschine gespannt und langsam und stoßfrei bis zum Bruch gedehnt. Während des Versuchs werden die auftretenden Zugkräfte und Verlängerungen aufgezeichnet. Nach Umrechnung (Berücksichtigung der Probenanmessungen) erhält man ein Spannungs-Dehnungs-Diagramm ( $\sigma$ - $\epsilon$ -Diagramm, Abb. 5).



Die anfängliche Gerade (Hookesche Gerade) stellt den Bereich der elastischen, nicht bleibenden Dehnung dar. Daran schließt sich der Bereich der plastischen Dehnung an. Der Übergang wird in der Technik durch die Streckgrenze markiert. Diese ist i.a. die Spannung bei einer bleibenden Dehnung von 0,2 % ( $R_{p0,2}$ ). Festigkeitssteigerung heißt demnach Erhöhung der Streckgrenze.

Abb. 5:  $\sigma$ - $\epsilon$ -Diagramm

Als Beispiel für die enormen aber wenig bekannten Auswirkungen der Gitterfehler auf die Festigkeit sei vorweg die Abb. 6 vorgestellt.



Sie stellt verschiedene, völlig unterschiedliche  $\sigma$ - $\epsilon$ -Kurven dar. Es ist ein harter, spröder Werkstoff erkennbar (Kurve 1), ein relativ weicher und gut verformbarer Werkstoff (Kurve 3) und ein Werkstoff, der eine gute Festigkeit mit einer ausreichenden Verformbarkeit kombiniert (Kurve 2).

Abb. 6:  $\sigma$ - $\epsilon$ -Kurven eines unlegierten C-Stahles

Diese völlig unterschiedliche Werkstoffverhalten zeigt jedoch ein einziger Werkstoff nach unterschiedlicher Wärmebehandlung. Kurve 1 zeigt den gehärteten, Kurve 2 den vergüteten und Kurve 3 den normalgeglühten Zustand des Stahls C45. Die Festigkeits- und Dehnbarkeitsunterschiede haben ihre Ursache in verschiedenen Gitterfehlern, die in unterschiedlicher Konzentration vorliegen.

Man teilt die Gitterfehler üblicherweise entsprechend ihrer räumlichen Ausdehnung in 4 Arten ein:

- 0-dimensionale (punktförmige)
- 1-dimensionale (linienförmige)
- 2-dimensionale (flächige)
- 3-dimensionale (räumliche)

### Linienförmige Gitterfehler:

Ich möchte mit den eindimensionalen Gitterfehlern beginnen, weil Festigkeitssteigerung, wie bereits erwähnt, eine Blockade dieser Gitterfehler bedeutet. Die einzigen eindimensionalen Gitterfehler sind die sog. „Versetzen“.

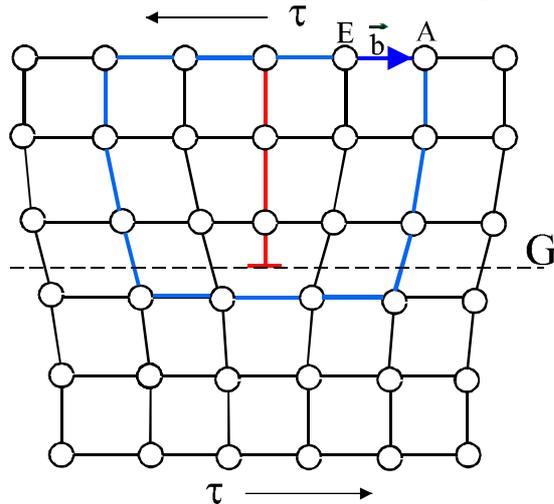


Abb. 7: Stufenversetzung mit Gleitebene G

und Burgersvektor  $\vec{b}$  (ermittelt durch einen „Burgersumlauf“ von A nach E, d. h. um einen Gitterfehler herum)

s. Abb.7. Nur mit ihrer Hilfe lassen sich Metalle plastisch verformen. Dies geschieht dadurch, dass sich die eingeschobenen Halbebenen unter Wirkung einer Schubspannung auf bestimmten Gleitebenen in bestimmte Richtungen bewegen (abgleiten). Es handelt sich dabei um eine Verschiebung von Stoffteilchen im festen Zustand, ohne daß der Zusammenhalt verloren geht. Das funktioniert oft auch bei Raumtemperatur. Die Versetzungen haben eine doppelte Bedeutung: Zum einen machen sie die gesamte Umformtechnik erst möglich, denn ohne sie wäre die zum Umformen nötige Spannung je nach Metall 100-1000fach größer als mit ihnen. Dies kommt daher, daß beim Umformen nicht eine gesamte Gitterebene auf einmal, sondern die Halbebene schrittweise gleitet. Und zum anderen führt eine hohe Versetzungsdichte zur Verfestigung des Werkstoffes, was als Verfestigungsmechanismus genutzt wird  $\Rightarrow$  Kaltverfestigung.

Die Wirkung der 1-dimensionsalen Gitterfehler (Versetzen) kann wie folgt beschrieben werden ( $\Delta R_p$  = Erhöhung der Streckgrenze):

$$\Delta R_{p,V} = \beta \cdot G \cdot \vec{b} \cdot \sqrt{\rho} \sim \sqrt{\rho}$$

mit  $\rho$  = Versetzungsdichte  $\sim 1/d$  (d = Abstand der Versetzungen)  
 $b$  = Burgersvektor, s.Abb 7  
 $\beta$  = Konstante

Anwendungsbeispiele:

- Drahtziehen  $\Rightarrow$  z.B. Klavierdrähte
- Tiefziehen  $\Rightarrow$  z.B. Pkw-Karosserien
- Recken und Verdrehen  $\Rightarrow$  Spannstahl für Stahlbeton

In den Abb. 8 ist der Zusammenhang zwischen der Versetzungsdichte und der Erhöhung der Festigkeit (hier ausgedrückt durch die Fließspannung  $\tau$ ) ersichtlich.

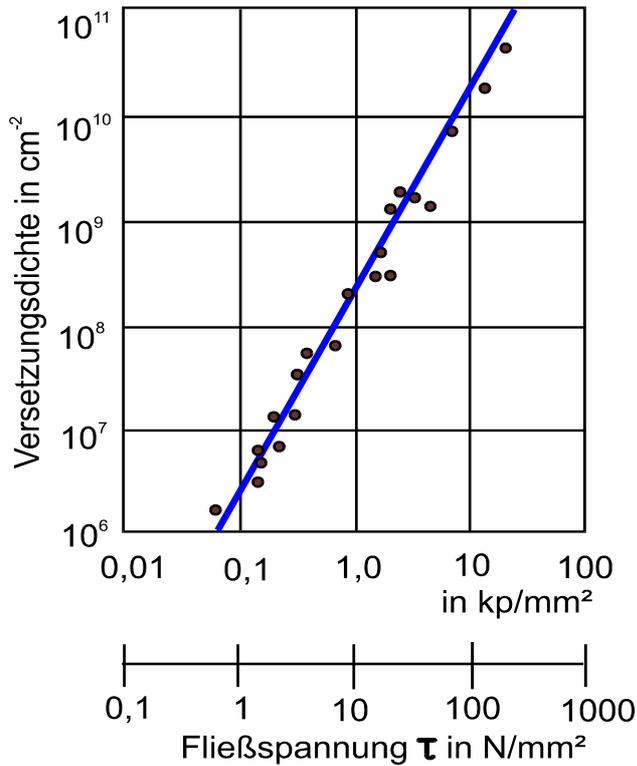


Abb. 8:  
Einfluß der Versetzungsdichte auf die Fließspannung am Beispiel von Kupfer<sup>2)</sup>

**Punktförmige Gitterfehler:**

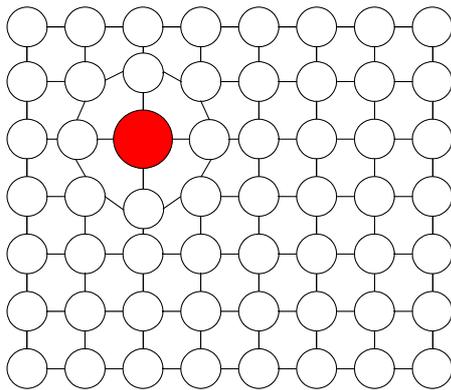


Abb. 9: Substitutionsatom

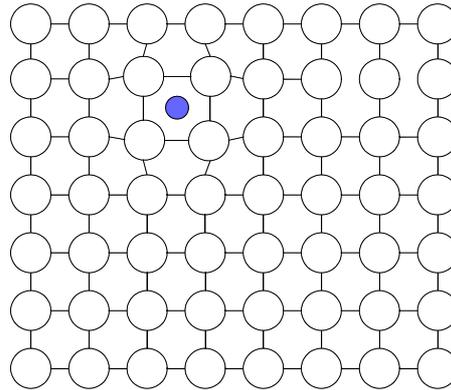


Abb. 10: Zwischengitteratom

Wird ein Metall legiert, so müssen die Atome des Legierungselementes im Wirtsgitter gelöst werden (feste Lösung). Wenn die Atomdurchmesser zwischen Wirts- und Legierungsatomen nicht mehr als  $\pm 14\%$  voneinander abweichen, können diese Legierungsatome Gitterplätze des Wirtsgitters einnehmen. Sind sie kleiner so werden sie im Zwischengitter gelöst. Kristalle bei denen eine zweite Atomsorte im Gitter gelöst ist, nennt man Mischkristalle.

Die Wirkung solcher 0-dimensionaler Gitterfehler auf die Festigkeit („Mischkristallhärtung“) kann wie folgt beschrieben werden:

$$\Delta R_{p, Mkr} = a \cdot G \cdot \sqrt{c} \sim \sqrt{c}$$

- mit  $a$  = Konstante = f(Atom- $\varnothing$ )
- $G$  = Schubmodul
- $c$  = Konzentration der Fremdatome

Anwendungsbeispiele:

- Legierung von Cu mit Zn oder Sn  $\Rightarrow$  Messing, Bronze
- Legierung von Fe mit Mn  $\Rightarrow$  S355J2G3 = St 52. Dieser hochfeste Baustahl zeigt dadurch, daß seine Festigkeit vorwiegend aus der Mischkristallhärtung stammt und nicht aus einem erhöhten C-Gehalt wie bei anderen Baustählen, ein besseres Schweißverhalten.

Negativbeispiele für Substitutionsmischkristalle: N  $\Rightarrow$  Alterung, H  $\Rightarrow$  Wasserstoffversprödung

In den Abb. 11a und b ist der Zusammenhang zwischen dem Gehalt an Legierungselementen und dem Ausmaß an Streckgrenzenerhöhung  $\Delta R_{p, Mkr}$  ersichtlich.

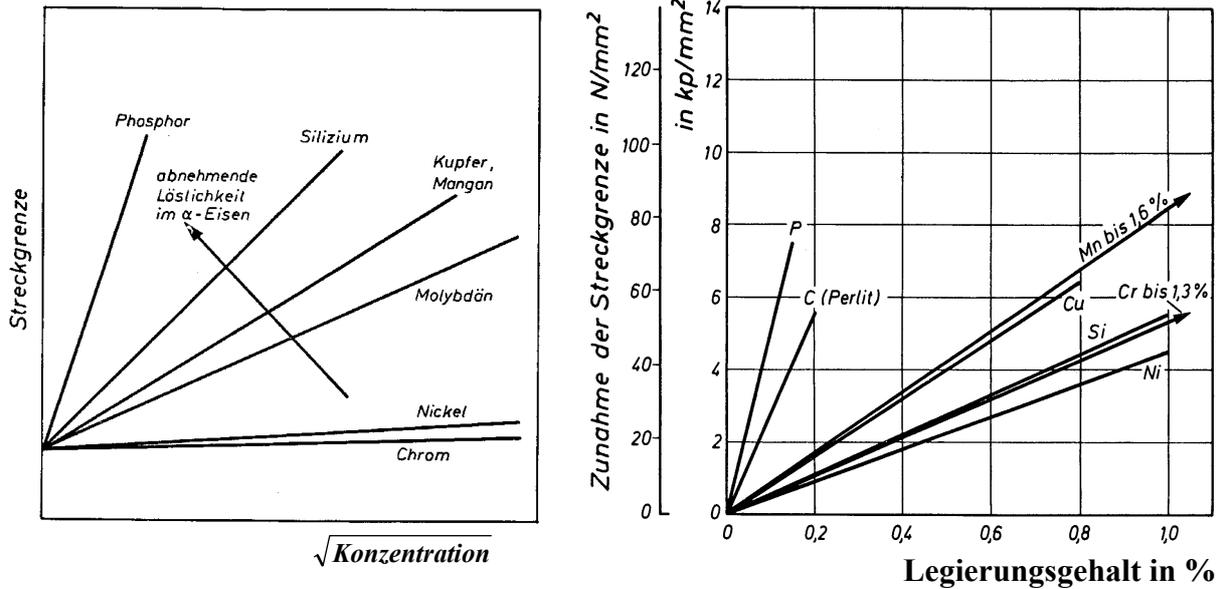


Abb. 11a,b: Mischkristallhärtung: Einfluß verschiedener Elemente auf die Streckgrenze von Stahl<sup>2)</sup>

Einen weiteren 0-dimensionalen Gitterfehler stellen die „Leerstellen“ dar, s. Abb.12. Dabei sind Gitterplätze z.T. nicht besetzt. Probleme bereiten Leerstellen besonders bei Hochtemperaturwerk-

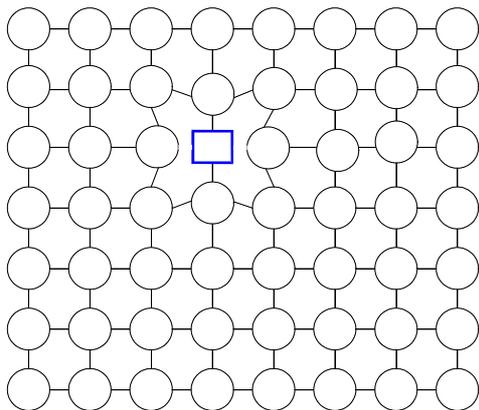
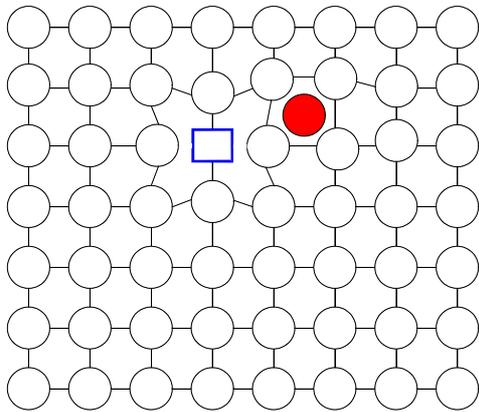


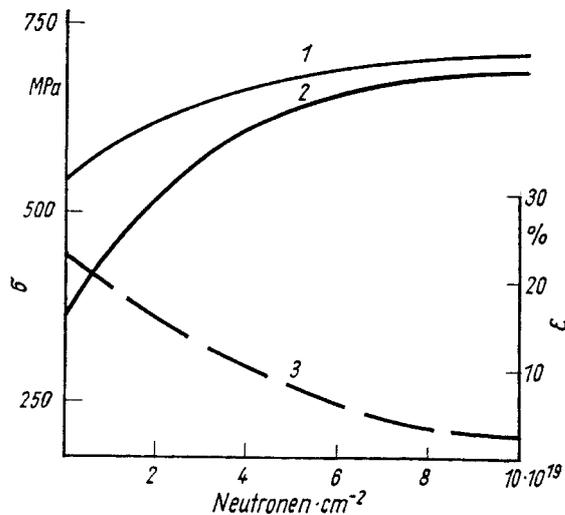
Abb. 12: Leerstelle

stoffen. Da bei hohen Temperaturen die Leerstellendichte enorm ansteigt, z.B. von  $10^{-12}$  bei Raumtemperatur auf  $10^{-4}$  (1 Leerstelle auf 10000 Atome) kurz vor dem Aufschmelzen, und die Leerstellen gleichzeitig eine höhere Beweglichkeit erlangen, können sie bei hohen Temperaturen wandern und sich auf den Korngrenzen sammeln. Dies führt zur Bildung von im Lichtmikroskop sichtbaren Mikroporen. Diese dienen als Rißstarter für Mikro- und Makrorisse, welche dann zur Zerstörung des Bauteils führen. Das Verfolgen des Porenwachstums ist eine wirksame Methode, die Restlebensdauer von Hochtemperaturbauteilen, z. B. in Kraftwerken zu beurteilen.



Der vierte 0-dimensionalen Gitterfehler sind die „Frenkel-Paare“, s. Abb.13. Ihre versprödende Wirkung hat wahrscheinlich zu einer großen Katastrophe in Mitteleuropa geführt, s.u. Der Fehler kommt dadurch zustande, daß Atome des Wirtsgitters durch energiereiche Korpuskularstrahlung, z.B. Neutronen, ins Zwischengitter verlagert werden und dabei Leerstellen hinterlassen. Die Folge ist eine Veränderung der mechanischen Eigenschaften, insbesondere eine Versprödung, s. Abb. 14.

Abb. 13.: Frenkel-Paar



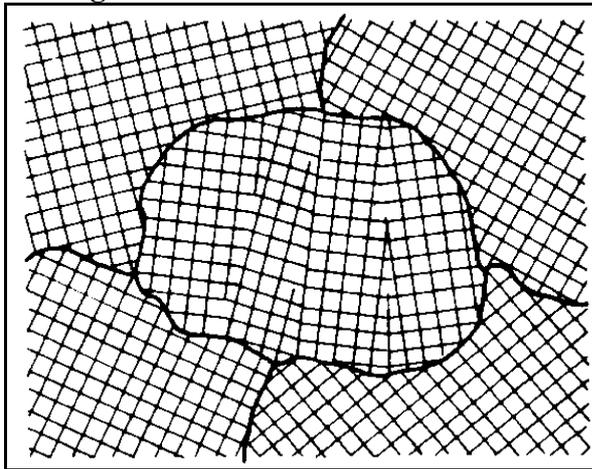
1 Zugfestigkeit  
2 Streckgrenze  
3 Dehnung

$\sigma$  = Spannung  
 $\epsilon$  = Dehnung

Abb. 14: Folgen des Frenkel-Defektes <sup>3)</sup>

Vor allem die in Kernkraftwerken der Neutronenstrahlung ausgesetzten Bauteile wie Hüllenwerkstoffe oder Reaktorgefäß zeigen solche Schädigungen. Wenn die Strahlenbelastung nicht zu groß war, d.h. wenn sich noch keine irreversiblen Mikroporen (Volumenvergrößerung) gebildet haben, läßt sich dieser wie die meisten Gitterfehler durch eine Temperaturerhöhung wieder beseitigen. Man vermutet nun, daß in Tschernobyl der Versuch dazu unternommen wurde. Dazu wurden die Graphitmoderatoren ausgefahren, so daß die Kernreaktion beschleunigt und damit die Temperatur erhöht wurde. Da anschließend Probleme mit dem Wiedereinfahren der Moderatorenstäbe auftraten, konnte die Kernreaktion nicht mehr unter Kontrolle gebracht werden.

### Flächige Gitterfehler:



Hier sind primär die Großwinkelkorngrenzen zu nennen, die entstehen, wenn beim Erstarren der Schmelze die wachsenden Kristallkeime zusammenstoßen. Da die Orientierung der einzelnen Kristalle statistisch verteilt ist, kann die Gitterordnung an den Grenzen nicht bestehen bleiben. Es kommt zu einer Anpassung der Orientierungen mit Hilfe von Fehlordnungen, s auch Abb.4, „G“. Diese Korngrenzen stellen Hindernisse für die Versetzungen dar und führen bei Verkleinerung der Körner, d.h. bei einer Verlängerung der Korngrenzen ebenfalls zu einer Erhöhung der Streckgrenze. Dieser Mechanismus zur Festigkeitssteigerung hat den

Abb. 15: Großwinkelkorngrenzen(schematisch)<sup>4)</sup>

Vorteil, daß er nicht zu einer Erniedrigung der Zähigkeit führt, was bei anderen Festigkeitsmechanismen der Fall ist.

Die Wirkung der 2-dimensionalen Gitterfehler (Korngrenzen) kann wie folgt beschrieben werden:

$$\Delta R_{p,KG} = k \cdot D^{-\frac{1}{2}} \sim \frac{1}{\sqrt{d}} \quad (\text{Gesetz von Hall und Petch})$$

mit  $d$  = mittlerer Korndurchmesser  
 $k$  = Konstante

Anwendungsbeispiel:

- Feinkornbaustähle

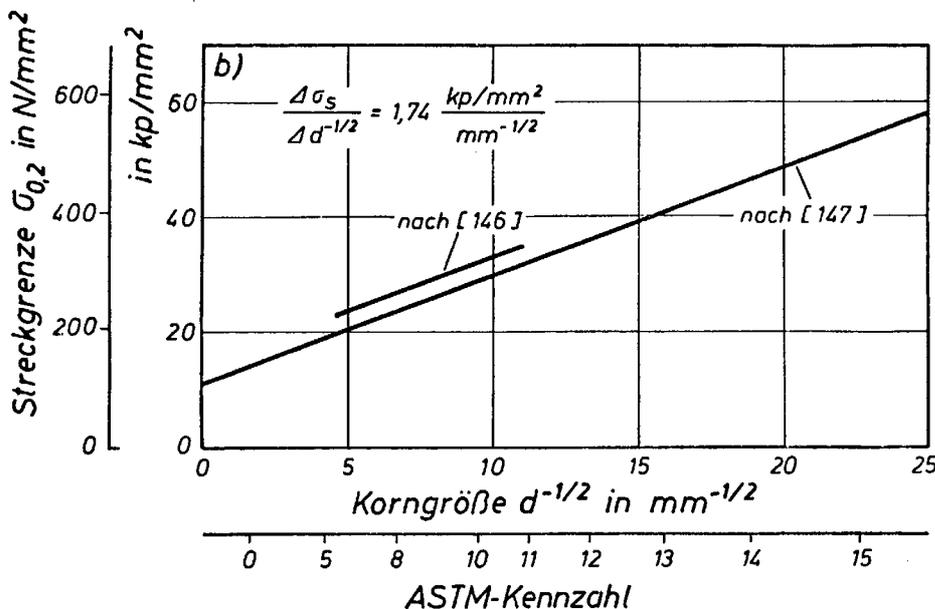


Abb. 16:

Linearer Zusammenhang zwischen Streckgrenze und Korngröße (Hall-Petch-Beziehung)

[146] Stahl mit 0,15% C und 1,5% Mn

[147] Stahl mit 0,17% C und 0,8% Mn

### Räumliche Gitterfehler:

Räumliche Gitterfehler entstehen durch Keimbildungs- und – wachstumsvorgänge im festen Werkstoff aufgrund von Diffusionsvorgängen (Ausscheidung aus einer festen Lösung, dem übersättigten Mischkristall). Die harten Partikel behindern die Versetzungsbewegung. Je nach Übereinstimmung des Gitters mit dem Wirtsgitter unterscheidet man kohärente, semikohärente und inkohärente Ausscheidungen, s. Abb. 17.

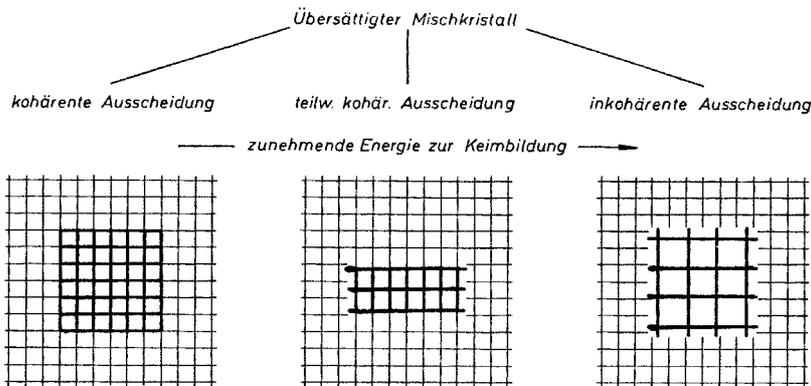


Abb. 17:

Schematische Darstellung der kohärenten und inkohärenten Ausscheidungen<sup>2)</sup>

Die kohärenten Ausscheidungen zeigen die größte Wirksamkeit. Dies liegt daran, daß die Gitterparameter der Ausscheidungen nicht wie in Abb. 16 gezeigt, exakt mit dem Wirtsgitter übereinstimmen, sondern eine geringe Fehlpassung zeigen. Dadurch bildet sich um die eigentliche Ausscheidung ein Spannungsfeld, so daß diese für eine Versetzung in einem größeren Bereich behindernd wirkt.

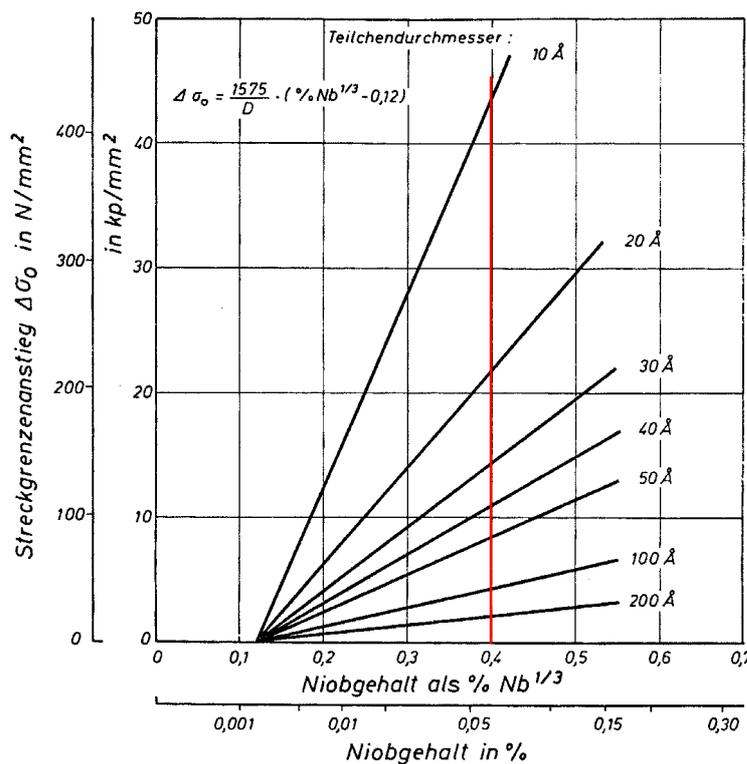


Abb. 18:

Zusammenhang zwischen Niobgehalt, Teilchengröße und Streckgrenzenanstieg<sup>2)</sup>

Damit die Teilchen (Ausscheidungen) eine optimale Wirkung zeigen, sollten sie möglichst klein, s. Abb.18, sowie möglichst hart sein. Der Abstand zwischen ihnen sollte möglichst gering und ihre Verteilung möglichst gleichmäßig sein. Je größer ihr Volumenanteil um so besser die Wirkung.

$$\Delta R_{p,T} = \alpha \cdot \frac{G \cdot \bar{b} \cdot f^{\frac{1}{3}}}{d}$$

mit  $\alpha$  = Faktor für die Verteilung der Teilchen  
 $f$  = Volumenanteil  
 $d$  = Teilchendurchmesser

Anwendungsbeispiele:

- $\text{Fe}_3\text{C}$  in Stahl  $\Rightarrow$  Perlit
- ausgehärtete Al-Legierungen  $\Rightarrow$  Guinier-Preston Zonen
- Nickelbasiswerkstoffe  $\Rightarrow$   $\gamma'$ -Phase ( $\text{Ni}_3\text{AlTi}$ )
- mikrolegierte Baustähle  $\Rightarrow$  Sonderkarbide (V, Ti, Nb)
- Nitrierstähle  $\Rightarrow$   $\text{AlN}$

Auch die bei Stählen häufig durchgeführte Abschreckhärtung (Härtung durch Abschrecken aus dem Gebiet der  $\gamma$ -Mischkristalle, Fe- $\text{Fe}_3\text{C}$ -Diagramm) beruht im Endeffekt auf der dadurch entstehenden hohen Fehlstellendichte, hervorgerufen durch eine Kombination verschiedener Gitterfehler.

### Grenzen der Festigkeitssteigerung bei Eisenwerkstoffen:

Bei Stählen mit höchster Festigkeit (z.Zt.  $R_p$  ca.  $4000 \text{ N/mm}^2$ ) werden die genannten Wirkungen der Gitterfehler (Festigkeitsmechanismen) kombiniert. Insbesondere bei der "thermomechanischen Behandlung" (TM-Stähle) werden durch gleichzeitiges Erzeugen verschiedener Gitterfehler, z.B. Versetzungen und Ausscheidungen, synergetische Wirkungen erzielt, die zu besonders hochfesten Stählen führen.

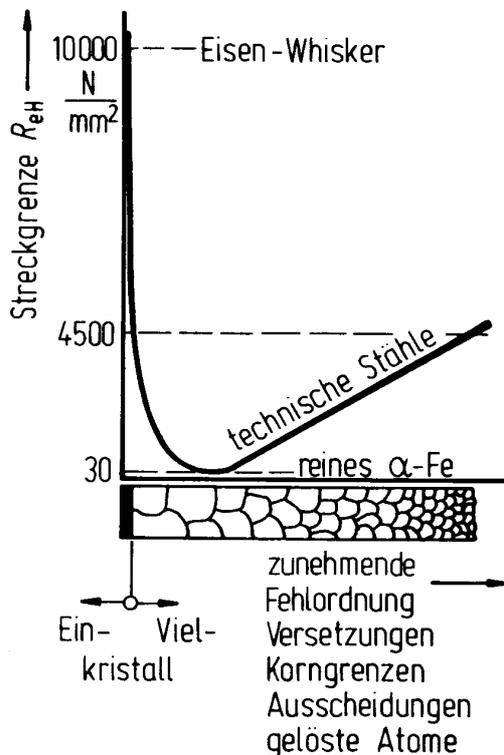


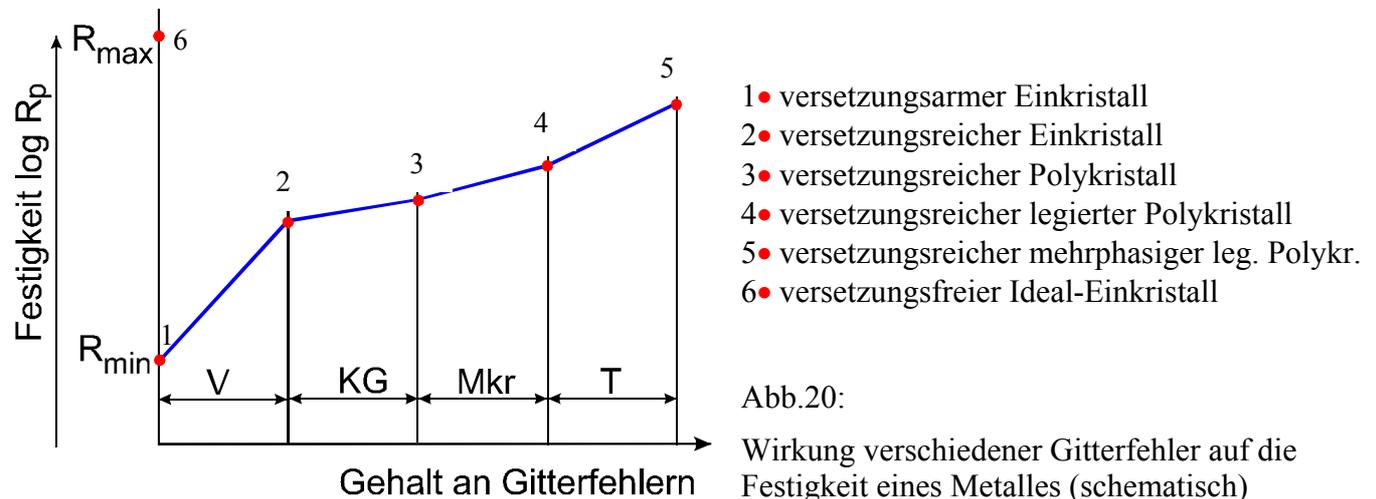
Abb. 19:  
 Bereich möglicher Festigkeit von Eisen  
 (Einfluß der Fehlordnung im Gitter  
 auf die Streckgrenze) <sup>4)</sup>

In Abb. 19 ist am Beispiel der Eisenwerkstoffe erkennbar, wo die Grenzen der Festigkeitssteigerung liegen. Ausgehend von einer nach dem Erschmelzen natürlicherweise enthaltenen Versetzungsdichte ( $R_{eH} \approx R_p \approx 30 \text{ N/mm}^2$ ) läßt sich durch Erhöhung der Fehlordnung mit Hilfe der beschriebenen Mechanismen eine ca. 150-fache Erhöhung der Streckgrenze erzielen. Andererseits führt eine Zurückführung der Gitterfehler auf Null (Idealkristall) auf eine noch deutlich höhere

Streckgrenze. Hier ist die interessante Rolle der Versetzungen zu erkennen. Zum einen führen sie bei hoher Dichte zu einer Steigerung der Festigkeit (Kaltverfestigung, s.o), zum anderen erniedrigen sie die zum Umformen benötigte Spannung um einen Faktor > 100 (je nach Metall) und machen so die Umformtechnik erst möglich.

Whisker (= Barthaare) sind fehlerfreie Einkristalle, die in kleinen Abmessungen herstellbar sind. Ihre hohe Festigkeit erhalten sie durch das völlige Fehlen von Versetzungen.

### Einsatz der Gitterfehler zur Festigkeitssteigerung (Überblick)



Die Streckgrenze eines metallischen Werkstoffs wird mit befriedigender Näherung beschrieben durch:

$$R_p = R_{p,min} + \Delta R_{p,V} + \Delta R_{p,KG} + \Delta R_{p,Mkr} + \Delta R_{p,T}$$

Literaturangaben:

- 1) „Werkstoffkunde Stahl“, Band 1, Springer
- 2) C. Straßburger, „Entwicklungen zur Festigkeitssteigerung der Stähle“, StahlEisen
- 3) W. Schatt, „Einführung in die Werkstoffwissenschaft“, Hüthig
- 4) Bargel/Schulze: „Werkstofftechnik“, Springer