Lösungen: Klausur 1 zu "Grundlagen der Materialwissenschaft III"

Aufgabe 1: Bindungstypen

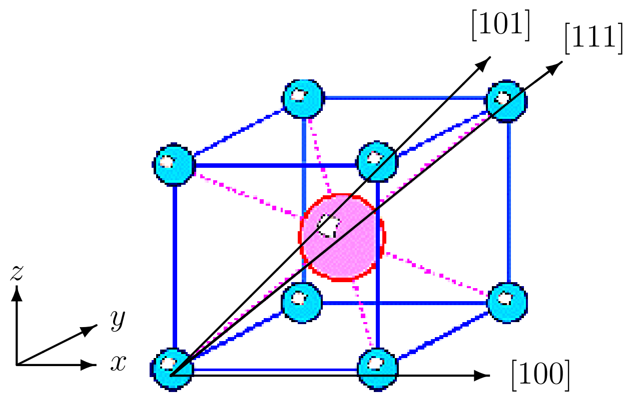
ionisch > kovalent $\gtrsim$ metallisch $\gg$ Wasserstoffbrücken > Van-der-Waals

Aufgabe 2: Hartkugelmodell

a) Einfach kubisch (sc), zwei Atome pro Einheitszelle.

b) $d_{\max} = a(\sqrt{3} - 1) = 0.732\, a$

c)



Aufgabe 3: Niederdimensionale Kristalldefekte

- nulldimensional (Punktdefekte): Leerstellen (Schottky-Defekt), Zwischengitteratome (Anti-Schottky-Defekt), Kombination der beiden (Frenkel-Paar), substitionelle Fremdatome, interstitielle Fremdatome (Einlagerungen),
- eindimensional (Liniendefekte): Versetzungen (Schrauben-, Stufen-)

Aufgabe 4: Defekte in Ionenkristallen

Ladungsneutralität

Aufgabe 5: Defekte in Legierungen

Wie in Aufgabe 3, aber zwei (oder mehr bei mehr als zwei Elementen) von jeder Sorte, nämlich für jede Atomsorte alle Punktdefekte aus Aufgabe 3.

Aufgabe 6: Leerstellen und Schmelzen

Die Leerstellenkonzentration eines Metalls ist gegeben durch $c_L = e^{-\frac{G_V}{k_B T}} = e^{\frac{S_V}{k_B}} e^{-\frac{H_V}{k_B T}}$

a) Am Schmelzpunkt: $c_L(T = T_m) \approx 10^{-4}$

b) $T_m = 1772\,°\mathrm{C} = 2045\,K$. Also folgt: $G_V \approx -k_B T_m \ln c_L(T = T_m) = 2.60 \times 10^{-19}\,\mathrm{J} = 1.63\,\mathrm{eV}$.

Aufgabe 7: Defekt-Gleichgewichte

a) (i) Interstitielles Fe **zweifach** positiv geladen:

$\mathrm{Fe(g)} \quad \leftrightarrow \quad \mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet} + 2e'$

MWG: $\quad K_1 = \dfrac{[\mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet}] \cdot n_{e'}^2}{p_{\mathrm{Fe}}}$

(ii) Interstitielles Fe **dreifach** positiv geladen:

$\mathrm{Fe(g)} \quad \leftrightarrow \quad \mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet\bullet} + 3e'$

MWG: $\quad K_1' = \dfrac{[\mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet\bullet}] \cdot n_{e'}^3}{p_{\mathrm{Fe}}}$

b) (i) Ladungsgleichgewicht: $\quad [\mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet}] = \frac{1}{2} n_{e'}$, $\quad$ also $\quad K_1 = \dfrac{n_{e'}^3}{2p_{\mathrm{Fe}}}$, $\quad$ also $\quad n_{e'} = \sqrt[3]{2K_1 p_{\mathrm{Fe}}}$

(ii) Ladungsgleichgewicht: $\quad [\mathrm{Fe}_i^{\bullet\bullet\bullet}] = \frac{1}{3} n_{e'}$, $\quad$ also $\quad K_1' = \dfrac{n_{e'}^4}{3p_{\mathrm{Fe}}}$, $\quad$ also $\quad n_{e'} = \sqrt[4]{3K_1' p_{\mathrm{Fe}}}$

Aufgabe 8: Entropie

Entropie ist ein Maß für die Unordnung eines Systems, d.h. ein (logarithmisches) Maß für die Anzahl W der Mikrozustände, die zum selben Makrozustand gehören: $S = k_B \ln W$

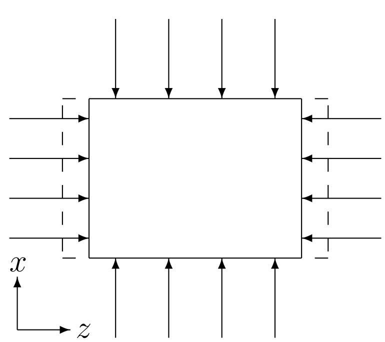
Aufgabe 9: Dehnungstensor

$$[\epsilon_{ij}] = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

Die ϵ_{xx}, ϵ_{yy}, ϵ_{zz} geben die Dehnungen in x-, y- und z-Richtung an. ϵ_{ij} mit $i \neq j$, gibt die Scherung der Ebene i in j-Richtung an.
Dehnung und Kompression arbeitet direkt gegen interatomare Potentiale und kostet mehr Kraft (pro Fläche), während Scherungen im wesentliche senkrecht zu den interatomaren Kräften stehen. Daher ist Schermodul meist nur einige 10% des Elastizitätsmoduls.

Aufgabe 10: Dehnung und Spannung

Ja, z.B. kann ein Material in z-Richtung komprimiert werden und sich in x- und y-Richtung ausdehnen wollen, aber durch einen entsprechenende Druck in x-Richtung daran gehindert werden, sich in x-Richtung auszudehnen.



Aufgabe 11: Hooke'sches Gesetz; Voigt-Notation

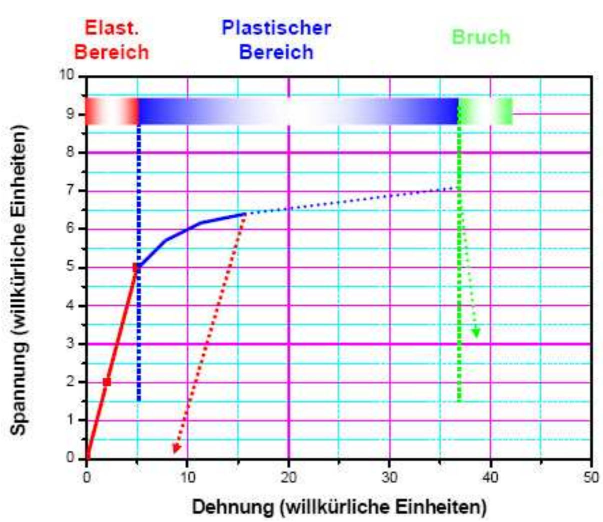
$$
\begin{aligned}
u_x &= x' - x = \delta y \\
u_y &= y' - y = 0 \\
u_z &= z' - z = 0
\end{aligned}
$$

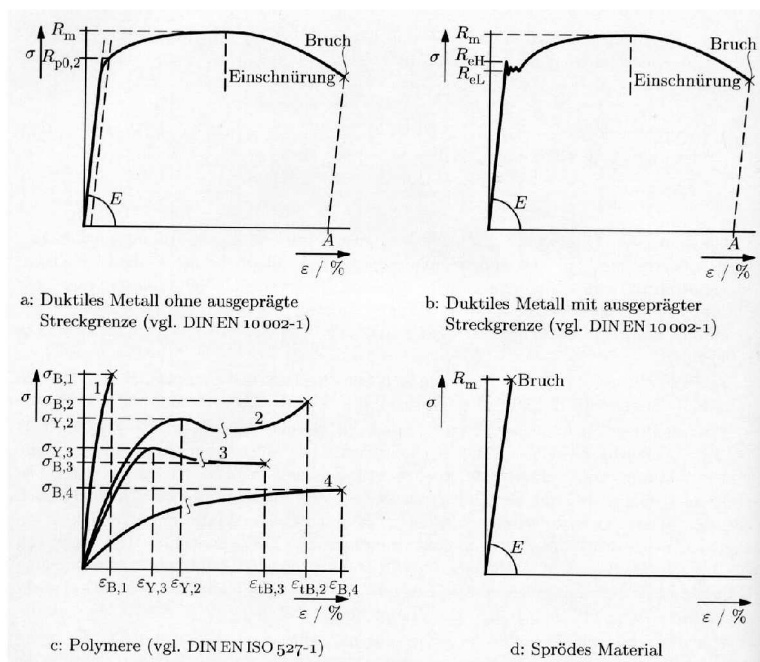
$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \quad \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \frac{\delta}{2}, \qquad \text{alle anderen } \epsilon_{ij} \text{ sind Null} \\
&\Rightarrow \quad (\epsilon_\alpha) = (0,0,0,0,0,\delta) \\
&\Rightarrow \quad (\sigma_\alpha) = (0,0,0,0,0,\delta\mu) \\
&\Rightarrow \quad \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \delta\mu, \qquad \text{alle anderen } \sigma_{ij} \text{ sind Null}
\end{aligned}
$$

Aufgabe 12: Poisson'sche Querzahl

Die Poisson'sche Querzahl ν gibt das Verhältnis von Querkontraktion zu Längsdehnung einer längs gedehnten Probe an. Je nach Wert von ν kann sich das Volumen bei Längung vergrößern ($\nu < 0.5$) oder verkleinern ($\nu > 0.5$). Meistens hat ν einen Wert zwischen 0.3 und 0.4. Für einige Materialien ist $\nu < 0$. Dann vergrößert sich das Material auch in zur Längsdehnung orthogonalen Richtung.

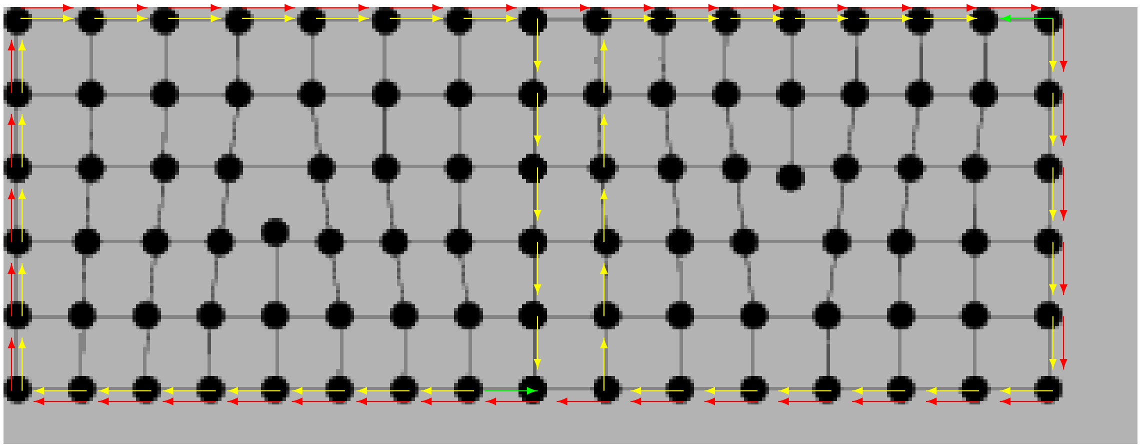
Aufgabe 13: Spannungs-Dehnungs-Kurve





- Elastischer Bereich: Dehnung in guter Näherung proportional zur Spannung, Verformung reversibel nach Wegfall der Kräfte , die die Dehnung verursachen.
- Plastischer Bereich: Verformung nicht reversibel.
- Bruch: Material zerreißt.

Aufgabe 14: Burgersumläufe



Umläufe: gelb; Burgersvektoren: grün; Gesamtumlauf (Burgersvektoren Null): rot.
Der energetisch günstigste Zustand des Kristalls ist der ohne Defekte. Da sich die eingezeichneten Defekte zu einem Zustand ohne Defekte annihilieren können, ziehen sie sich an.

Aufgabe 15: Stufen- und Schraubenversetzungen

a) Die Stufenversetzung hat mehr Energie.

b) Stufenversetzung: Burgersvektor senkrecht zur Versetzungslinie.
Schraubenversetzung: Burgersvektor parallel zur Versetzungslinie.

c) Stufenversetzung bewegt sich senkrecht zur Versetzunglinie parallel oder antiparallel zum Burgersvektor.
Schraubenversetzung bewegt sich senkrecht zur Versetzunglinie, ansonsten aber in beliebige Richtung.

Aufgabe 16: Peach-Köhler

Das angegebene Spannungsfeld besitzt keine Scherkomponenten die die z-Richtung involvieren und gehört daher zu einer Stufenversetzung, deren Versetzungslinie paralllel zur z-Achse liegt.
Kurzfassung (wie in der Klausur gefordert):
Der Burgersvektor der Stufenversetzung steht senkrecht auf der z-Achse. Wähle

$$\vec{b}_{\text{edge}} = b_{\text{edge}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nach Aufgabenstellung haben Linienvektor und Burgersvektor der Schraubenversetzung daher die Form

$$\vec{s}_{\text{screw}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{b}_{\text{screw}} = b_{\text{screw}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

so dass

$$\sigma_{\text{edge}} \cdot \vec{b}_{\text{screw}} = b_{\text{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = b_{\text{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yx} \\ 0 \end{pmatrix}$$

und damit nach Peach-Köhler

$$\vec{F}_{\mathrm{e\,on\,s}} = (\sigma_{\mathrm{edge}} \cdot \vec{b}_{\mathrm{screw}}) \times \vec{s}_{\mathrm{screw}} = b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yx} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -b_{\mathrm{screw}}\sigma_{yx} \end{pmatrix}$$

<u>Allgemeine Fassung</u>:
Der Burgersvektor der Stufenversetzung steht senkrecht auf der z-Achse und hat daher die allgemeine Form

$$\vec{b}_{\mathrm{edge}} = b_{\mathrm{edge}} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nach Aufgabenstellung haben Linienvektor und Burgersvektor der Schraubenversetzung daher die Form

$$\vec{s}_{\mathrm{srew}} = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{b}_{\mathrm{screw}} = b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix}.$$

so dass

$$\sigma_{\mathrm{edge}} \cdot \vec{b}_{\mathrm{screw}} = b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} = b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}\cos\varphi + \sigma_{xy}\sin\varphi \\ \sigma_{yx}\cos\varphi + \sigma_{yy}\sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

und damit nach Peach-Köhler

$$\begin{aligned} \vec{F}_{\mathrm{e\,on\,s}} &= (\sigma_{\mathrm{edge}} \cdot \vec{b}_{\mathrm{screw}}) \times \vec{s}_{\mathrm{screw}} \\ &= b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}\cos\varphi + \sigma_{xy}\sin\varphi \\ \sigma_{yx}\cos\varphi + \sigma_{yy}\sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})\cos\varphi\sin\varphi + \sigma_{xy}\sin^2\varphi - \sigma_{yx}\cos^2\varphi \end{pmatrix} \\ &= b_{\mathrm{screw}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})\sin 2\varphi - \sigma_{xy}\cos 2\varphi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Spezialfälle:

- Burgersvektor $\vec{b}$ parallel zur x-Achse: $\varphi = 0, \quad \vec{F}_{\mathrm{e\,on\,s}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -b_{\mathrm{screw}}\sigma_{xy} \end{pmatrix}$
- Burgersvektor $\vec{b}$ parallel zur y-Achse: $\varphi = \pi/2, \quad \vec{F}_{\mathrm{e\,on\,s}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_{\mathrm{screw}}\sigma_{xy} \end{pmatrix}$