

Werkstoffwissenschaften

von Gerald Meier

1 Atomstruktur

VAN DER WAALS-Bindung	< 0,25 eV	Schwerpunktsverlagerung der e ⁻ ⇒ elektr. Dipolmoment, „Polarisation“
kovalente Bindung	1 ÷ 8 eV	e ⁻ -Austausch zwischen Nachbarn
metallische Bindung	1 ÷ 7 eV	e ⁻ -Austausch: Elektronenpool, -see
Ionen-Bindung	3 ÷ 10 eV	e ⁻ -Übergang zwischen Nachbarn (Kationen, Anionen)

2 Kristallstruktur

2.1 Kristallgittertypen

	dichtest gepackte Richtung / Fläche	Beispiele	Atome/Zelle / Koordinationszahl
kubisch primitiv	-	-	-
kubisch flächenzentriert (kFz)	<110> {111}	Al, Cu, Ag, Au, γ-Fe	4 / 12
kubisch raumzentriert (kRz)	<111>	Na, Mo, α-Fe, β-Ti	2 / 8
hexagonal (hex)	-	Mg, Zn, Cd, α-Ti, O-Teilgitter von Fe ₂ O ₃ , Al ₂ O ₃	6 / 12
Diamant	-	Si, Ge	8 / 4
⇒ zwei versetzte kFz-Gitter			
NaCl	-	MgO, FeO	-
⇒ zwei versetzte kFz-Gitter			
SiO ₄ ⁴⁻ -Tetraeder	-	Baustein v. Quarz (kristallin), Silikatglas (amorph)	-
C-Kette	-	Hochpolymere	-

2.2 MILLERSche Indizes

spezielle Gitterrichtung $[1 \ 2]$

allgemeine Gitterrichtung $\langle 1 \ 2 \rangle = [1 \ 2], [\bar{1} \ 2], [2 \ 1], [2 \ \bar{1}], \dots$

spezielle Gitterebene $(1 \ 4)$

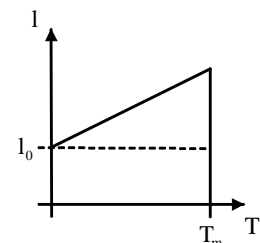
allgemeine Gitterebene $\{1 \ 4\} = (1 \ 4), (\bar{1} \ 4), (4 \ 1), (\bar{4} \ \bar{1}), \dots$

2.3 Thermische Ausdehnung

$$\frac{\Delta l}{l_0} = \alpha \cdot \Delta T \quad \alpha \approx \frac{7}{3} \cdot 10^{-2} / T_m$$

α: linearer Ausdehnungskoeffizient (schwach T-abhängig)

für kristalline Stoffe bei $\Delta T = T_m - 0K$ gilt $\frac{\Delta \text{Volumen}}{\text{Volumen}} \approx 7\%$



3 Gitterfehlordnung

3.1 0-dimensionale Gitterfehler

3.1.1 Punktfehlstellen

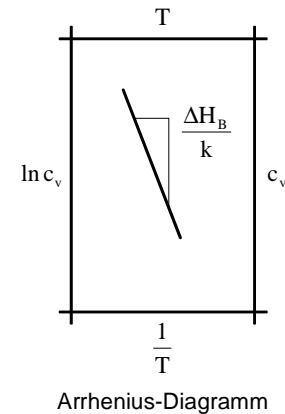
$$c_v = \frac{n(\text{Leerstellen})}{N(\text{Gitterplatze})} = e^{-\frac{\Delta G_B}{kT}} = e^{-\frac{\Delta H_B + \Delta S}{kT}} = c_{v0} \cdot e^{-\frac{\Delta H_B}{kT}}$$

$$c_v \approx e^{-\frac{\Delta H_B}{kT}}$$

$$\Delta H_B \approx 1\text{eV}$$

3.1.2 Zwischengitteratome

$$\Delta H_B \approx 3,5\text{eV} \quad (\text{bei Cu})$$



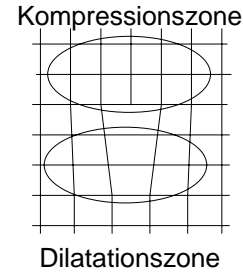
3.2 1-dimensionale Gitterfehler

Versetzungen

$$\Delta H_B = 4 \div 6\text{eV} \cdot \frac{\text{Versetzungslaenge}}{\text{Atomabstand}}$$

$$\text{Energie: } E = \alpha G b^2 l$$

l: Lange
G: Schubmodul
 α : 0,5 \div 1



Versetzungsdichte:

$$\rho = \frac{\text{Versetzungslaenge}}{1\text{m}^3}$$

$= 10^{12} \text{ m}^{-3}$
 $= 10^{16} \text{ m}^{-3}$
 $= 10^3 \text{ m}^{-3}$

Versetzungsarme Metalle
stark verformte Metalle
Si-Einkristall

3.3 2-dimensionale Gitterfehler

3.3.1 Stapelfehler

$$10^{-4} \div 10^{-7} \text{ J/cm}^2$$

intrinsischer Stapelfehler: eine Schicht wurde entfernt:

ABCACABC

extrinsischer Stapelfehler: eine Schicht wurde zugefugt:

ABCACBCABC

3.3.2 Korngrenzen

Zwillingskorngrenze: $5 \cdot 10^{-6} \text{ J/cm}^2 = 0,05 \text{ J/m}^2$

Großwinkelkorngrenze: $5 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2 = 0,5 \text{ J/m}^2$

Kleinwinkelkorngrenze: ($\leq 10^\circ$)

- Kippgrenze (vgl. Abbildung)

$$\sin \frac{\beta}{2} = \frac{b}{2D}$$

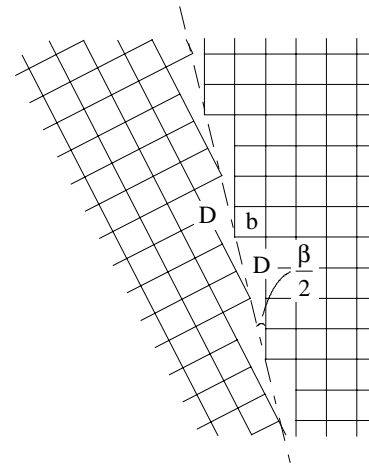
- Drehgrenze

Phasengrenze

Textur

Vorzugsrichtung \rightarrow Anisotropie

- Verformungstextur
- Wachstumstextur



Kleinwinkelkorngrenze

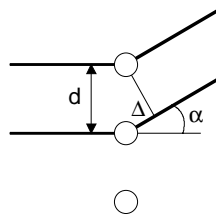
4 Mikroskopie

4.1 Beugung

Maximum: $\Delta = n \cdot \lambda \quad n \in \mathbb{N}$

4.1.1 Punktgitter

$$\Delta = d \cdot \sin \alpha$$

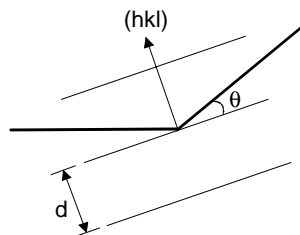


4.1.2 Raumgitter

$$\Delta = 2d \cdot \sin \theta$$

bei kubischen Gittern:

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$



4.2 Auflösungsvermögen

$$d = \frac{\lambda}{\sin \alpha}$$

\rightarrow Lichtmikroskop $\sin \alpha \approx 1 \rightarrow d \approx \lambda \approx 0,4 \mu\text{m}$

\rightarrow Elektronenmikroskop $\sin \alpha \approx 10^{-2} \rightarrow d \approx 10^2 \lambda \approx 0,4 \text{ nm}$

5 Zustandsdiagramme

5.1 Thermodynamik

5.1.1 freie Enthalpie G

$$G = H - TS$$

H: Enthalpie

T: absolute Temperatur (0°C ↔ 273K)

S: Entropie

$$H = U + p \cdot V$$

U: innere Energie / Wärmehalt

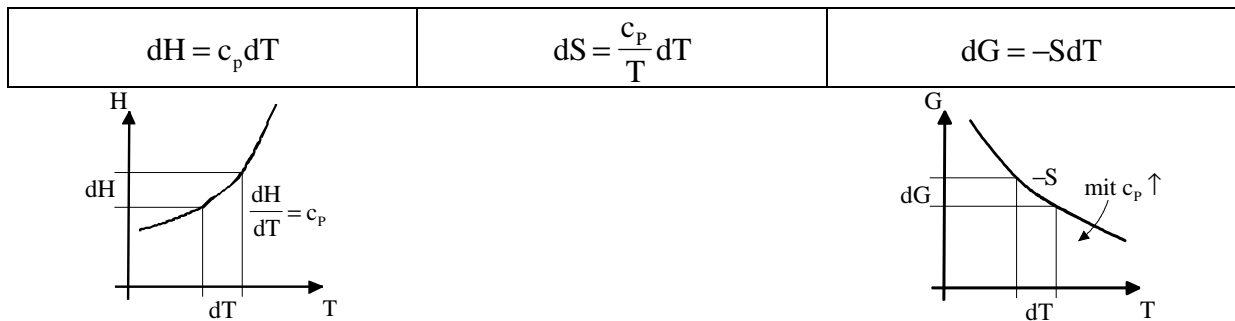
pV: Volumenarbeit

Dulong-Petit-Gesetz: $c_p \approx 25 \frac{\text{J}}{\text{molK}}$

c_p : spezifische Wärme (bei p=konst)
für Metalle (kristalline Festkörper)

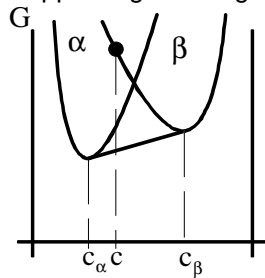
c_p ist umso kleiner je fester die Bindung ist

⇒ $c_{p \text{ Schmelze}} > c_{p \text{ Fest}}$



5.1.2 Zweikomponentensysteme (binäre Systeme)

Doppeltangentenregel



Hebelgesetz

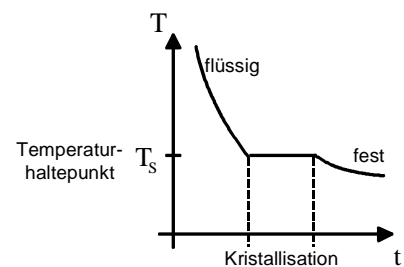
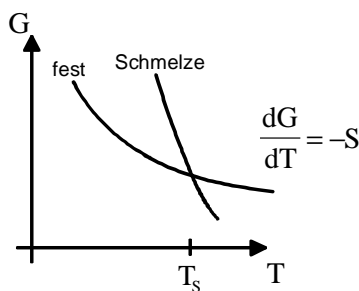
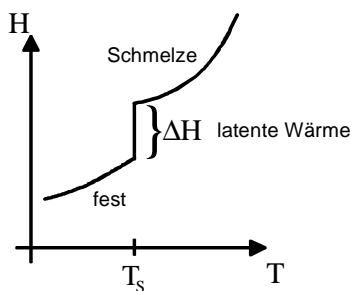
$$\frac{m_\alpha}{m_\beta} = \frac{|c - c_2|}{|c - c_1|}$$

$$\frac{m_\alpha}{M} = \frac{|c - c_2|}{|c_2 - c_1|}$$

$$G = \frac{G_\alpha(c_1)m_1 + G_\beta(c_2)m_2}{M}$$

6 Phasenumwandlung

6.1 Schmelzen



6.2 Diffusion

Selbstdiffusion z.B. Cu₆₃²⁹ und Cu₆₄²⁹

Fremdatomdiffusion z.B. Cu und Sn

6.2.1 FICKSche Diffusionsgesetze

$$j = -\text{grad}(c)$$

eindimensional: $j = -D \frac{dc}{dx}$ $\left[= \frac{\text{Zahl der Atome}}{\text{Fläche Zeit}} \right]$

$$\dot{c} = -\text{div}(j)$$

eindimensional: $\dot{c} = D \frac{d^2c}{dx^2}$

6.2.2 Diffusionskoeffizient

a) Selbstdiffusion

$$D = D_0 e^{-\frac{Q}{kT}}$$

$$Q = \Delta H_B + \Delta H_W$$

ΔH_B : Aktivierungsenergie für Bildung einer Leerstelle

ΔH_W : Aktivierungsenergie für Wanderung des Atoms in Leerstelle

Typische D-Werte bei Metallen		$Q_D / (\text{kJ/mol})$	Q_D / eV	T_s / K
$10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$	$T = \frac{2}{3} T_m$	Al 142	1,47	933
$10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$	$T < T_m$	α -Fe 250	2,6	1800
$10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$	$T \approx T_m$	Mo 386	4	2890

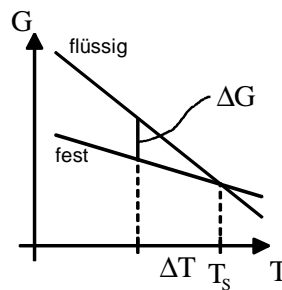
b) Zwischengittermechanismus

C in α -Fe: $Q=0,8\text{eV}$

6.3 Keimbildung

$$\Delta G = \text{const} \cdot (T_s - T) = \text{const} \cdot \Delta T$$

$$\Delta g = \frac{\Delta G}{V} = -a\Delta T$$



$$\Delta G = \Delta G_V + \Delta G_S$$

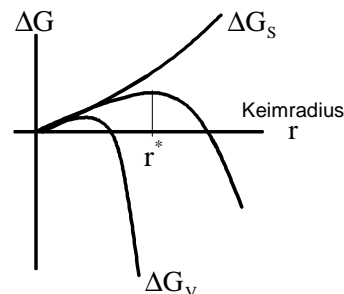
aus chemischer Bindung

$$\Delta G_V = - \underbrace{\frac{4}{3}\pi r^3}_{\text{Volumen}} a\Delta T$$

Grenzflächen-Aufwand

$$\Delta G_S = \underbrace{4\pi r^2}_{\text{Oberfl.}} \gamma$$

γ : Oberflächenenergie



Maximum bei $r^* = \frac{2\gamma}{a\Delta T}$

$\Delta G^* = \Delta G(r^*) \propto \frac{\gamma^3}{\Delta T^2}$

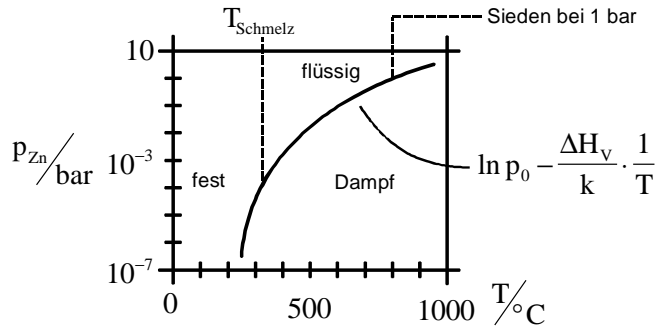
Keimbildungswahrsch. $\propto e^{-\frac{\Delta G^*}{kT}}$

heterogene Keimbildung: Bildung mit Hilfe von Fremdatomen (Gefäßwand, Verunreinigungen, ...)
homogene Keimbildung: Bildung aus sich heraus (zufällige Atomzusammenlagerungen)

6.4 Umwandlung Dampf ↔ kondensierte Phase

im Gleichgewicht: $p^{Gl}(T) = p_0 \cdot e^{-\frac{\Delta H_V}{kT}}$

ΔH_V : Aktivierungsenergie der Verdampfung



7 Mechanische Eigenschaften

7.1 Elastizität

Elastizitätsmodul E

Spannung $\sigma_0 = \frac{F}{S_0}$

Dehnung $\epsilon_0 = \frac{\Delta l}{l}$

HOOKESches Gesetz: $\sigma_0 = E \cdot \epsilon_0$

Schubmodul G

Spannung $\tau = \frac{F}{S_0}$

Scherung $\gamma = \frac{\Delta y}{h}$

HOOKESches Gesetz: $\tau = G \cdot \gamma$

Kompressionsmodul K

Allseitiger Druck $p = \frac{F}{S_0}$

Kompressibilität $\chi \equiv \frac{1}{K}$

HOOKESches Gesetz: $p = -K \frac{\Delta V}{V}$

Elastische Verformung: Verformung ist reversibel und zeitunabhängig.

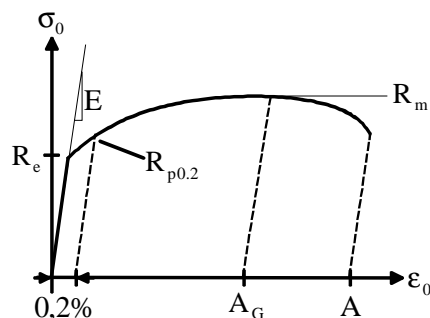
Anelastische Verformung: Verformung ist reversibel und zeitabhängig.

Irreversible Verformung: plastische Verformung (mit Fließgrenze)
 amorphe Verformung (ohne Fließgrenze)

Zusammenhang über Querkontraktionszahl ν z.B. $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$

7.2 Spannungs-Dehnungs-Kurven

- R_E : Elastizitätsgrenze
- R_p : Streckgrenze, Fließgrenze
- R_m : Zugfestigkeit
- A: Bruchdehnung
- A_g : Gleichmaßdehnung



7.3 plastische Verformung

(plastische) Verformungsgeschwindigkeit

$$\dot{\epsilon} = M \frac{\text{Scherung}}{\text{Zeit}}$$

$$\dot{\epsilon} = M b n_v v$$

M: Geometriefaktor

$$n_v = \frac{w}{hS} \text{ Versetzungsdichte}$$

b: Burgersvektor

Versetzungsgeschwindigkeit

$$v = v_0 (\sigma - \sigma_i)^m$$

σ : äußere Spannung

σ_i : innere Gegenspannung

in reinen Metallen

$$\sigma_i = G b \sqrt{n_v}$$

$10^8 / \text{m}^2 \leq \sigma \leq 10^{12} / \text{m}^2 \rightarrow$ Beginn der plast. Verformung
 $10^{-5} G \leq \sigma \leq 10^{-3} G$

\Rightarrow

$$\dot{\epsilon} = M b v_0 n_v (\sigma - \alpha G b \sqrt{n_v})^m \quad \alpha \leq 1$$

\Rightarrow

$$\dot{\epsilon} = M \frac{D G b}{k T} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^3$$

durch $n_v = \left(\frac{\sigma}{G b} \right)^2 \quad v = \frac{D \sigma b^3}{b k T}$

Allgemein

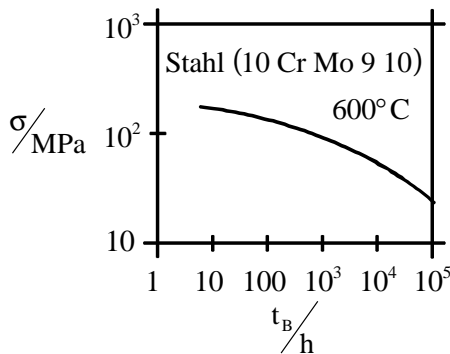
$$\dot{\epsilon} = A \frac{D G b}{k T} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n$$

$n \geq 3$

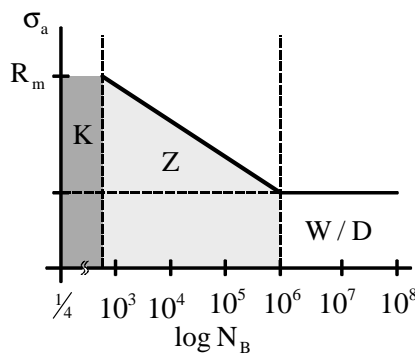
$$\dot{\epsilon} \propto \sigma^n e^{-\frac{Q}{kT}}$$

$Q \approx H_D$

Zeitstanddiagramm mit Zeitbruchlinie



Wöhlerkurve



K: Kurzzeitfestigkeit

Z: Zeitfestigkeit

W/D: Wechsel- / Dauerfestigkeit

7.4 Härteprüfung

Brinell	Vickers	Rockwell	Knoop
<p>Stahl Hartmetall $1 \leq \frac{D}{\text{mm}} \leq 10$</p>	<p>136° Diamant</p>	<p>Diamant Stahl</p>	<p>Diamant</p>
HB F/O	HV F/O	HR in 0,02mm Eindringtiefe	HK F/O in $\frac{9,81N}{\text{mm}^2}$
Eindruck groß für heterogene Werkstoffe geeignet	Eindruck klein für Mikrohärtge geeignet		Anisotropien feststellbar

Oft $R_m \propto \text{Härte}$

$$\text{Kerbschlagzähigkeit } a_k = \frac{mgh_1 - mgh_2}{S}$$

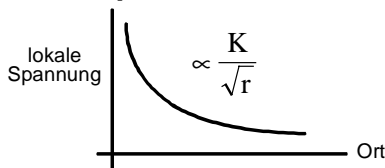
m: Masse des Fallhammers
 h₁: Anfangshöhe des Fallhammers
 h₂: Endhöhe des Fallhammers
 S: Querschnitt der Probe

7.5 Bruch

7.5.1 zäher (duktiler) Bruch

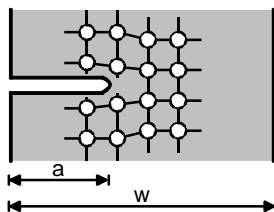
- Einschnürung
- Hohlraumbildung
- Zusammenwachsen der Hohlräume
- Abscheren: „Wabenbruch“

7.5.2 spröder Bruch



r: Abstand zur Rißspitze
 K: Spannungsintensität

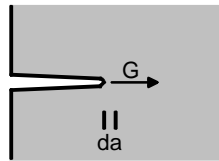
Spannungsbetrachtung



$$K = \sigma \sqrt{\pi a} Y \left(\frac{a}{w} \right)$$

$$K \approx \sigma \sqrt{\pi a} \text{ für } a \ll w$$

Energiebetrachtung



$$G = \frac{\text{freiwerdende Energie}}{da \cdot \text{Rißfrontlänge}}$$

$$G = \underbrace{\text{const.}}_{\approx 1} \cdot \frac{K^2}{E}$$

Bruch erfolgt wenn

- $K > K_c$ = kritische Spannungsintensität (oder Rißzähigkeit)
- $G > G_c \equiv R$ = Rißwiderstand = Energie pro Rißfrontlänge die pro Rißverlängerung mit der Geschwindigkeit \dot{a} aufgebracht werden muß