

Übung zur Vorlesung Materialwissenschaften

Prof. Peter Müller-Buschbaum, Lea Westphal, Ziyang Zhang, Doan Duy Ky Le

Übungsblatt 1

Lösung

Aufgabe 1 - Materialklassen

| Eigenschaft | Metalle | Gläser | Keramiken | Polymere | Elastomere | Hybridmaterialien |
|---------------------------|------------|-------------|------------|------------|------------|-------------------|
| Elastizitätsmodul | hoch | niedrig | hoch | niedrig | niedrig | variierend |
| Festigkeit | hoch | / | hoch | hoch | variierend | variierend |
| Schlagzähigkeit | hoch | gering | hoch | variierend | hoch | variierend |
| Verformbarkeit | leicht | mit T | schwer | leicht | leicht | schwer |
| Härte | variierend | hoch | hoch | gering | gering | variierend |
| Thermische Leitfähigkeit | hoch | variierend | variierend | niedrig | niedrig | variierend |
| Elektrische Leitfähigkeit | hoch | nein | niedrig | niedrig | niedrig | variierend |
| Korrosionsverhalten | leicht | nicht | nicht | nicht | nicht | variierend |
| Sprödigkeit | nein | ja | ja | variierend | T-abhängig | variierend |
| Optische Eigenschaften | glänzend | transparent | opak | variierend | variierend | variierend |

Aufgabe 2 – Passende Materialeigenschaften

a) Material für Baggerzähne:

- Sehr hohe mechanische Beanspruchung durch Schneiden, Schaufeln und Zerkleinern von Gestein und Erde.
- Wichtig: hohe Härte H für Verschleißbeständigkeit.
- Zusätzlich: hohe Bruchzähigkeit K_{Ic} , damit kein Abbrechen erfolgt.
- Korrosionsbeständigkeit bei Einsatz in Wasser, Schlamm etc. von Vorteil.
- Materialkosten sind nachrangig – entscheidend ist die Vermeidung von Ausfallzeiten.

b) Material für energieeffizienten Kochtopf:

- Gute Wärmeübertragung und -verteilung erforderlich → hohe Wärmeleitfähigkeit λ .
- Korrosionsbeständigkeit gegenüber:
 - * Salzwasser,
 - * Säuren (z.B. Essig),
 - * Laugen (z.B. Backpulver).
- Typische Materialien: Aluminium- oder Kupferkern, evtl. mit Edelstahlbeschichtung.

c) Material für umweltschonende Einweg-Wasserflaschen:

- **Wesentliche Anforderungen:**
 - * Ungiftigkeit – keine Schadstoffabgabe an Wasser.
 - * Frei von Rückständen aus der Verarbeitung.

- * Günstig herstellbar – Massengebrauch.

– **Wünschenswerte Eigenschaften:**

- * Recyclingfähigkeit oder biologische Abbaubarkeit.
- * Mechanisch robust – nicht spröde, leicht transportierbar.
- * Geringes Gewicht und transparenter Werkstoff bevorzugt.

Aufgabe 3 – Kristallstrukturen und Dichte

a) Verhältnis $c/a = 1,633$ bei hcp:

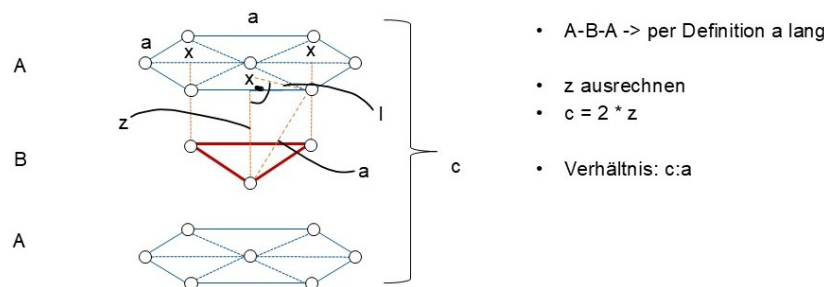


Abbildung 1: Skizze schichtweise Aufbau hcp-Struktur

- Die hcp-Struktur besteht aus drei Kugelschichten in ABA-Stapelung mit dichtester Packung.
- In einer A-Schicht bilden drei Atome ein gleichseitiges Dreieck mit Seitenlänge a .
- Das Atom der B-Schicht befindet sich direkt über dem Mittelpunkt dieses Dreiecks.
- Abstand vom Mittelpunkt zum Eckatom: $l = \frac{a}{\sqrt{3}}$.
- Senkrechter Abstand zwischen A- und B-Schicht: $z = \sqrt{a^2 - l^2} = \sqrt{\frac{2}{3}}a$.
- Die Zellenhöhe ergibt sich zu $c = 2z = \sqrt{\frac{8}{3}}a$.
- Damit folgt: $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$.

b) Dichte von Lithium (bcc):

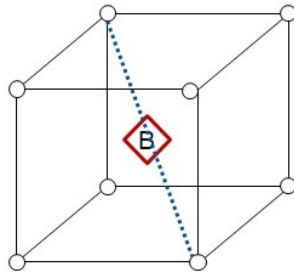
- Struktur: kubisch raumzentriert (bcc), 2 Atome pro Elementarzelle.
- Gegeben: Atomradius $r = 0,152$ nm, Atommasse $M = 6,94$ g/mol.
- Gitterkonstante: $a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4 \cdot 0,152}{\sqrt{3}} \approx 0,351$ nm.
- Zellvolumen: $V = a^3 = (0,351 \cdot 10^{-7} \text{ cm})^3 \approx 4,33 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$.
- Dichteformel: $\rho = \frac{n \cdot M}{N_A \cdot V}$, mit $n = 2$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$.
- Eingesetzt:

$$\rho = \frac{2 \cdot 6,94}{6,022 \cdot 10^{23} \cdot 4,33 \cdot 10^{-23}} \approx 0,534 \text{ g/cm}^3.$$

- Ergebnis stimmt mit Literaturwert überein.

Aufgabe 4 – Ionengrößenverhältnis und Packungsdichte

a) Größenverhältnis $R_k/R_a \geq 0,732$ bei Koordinationszahl 8:



- $RD = \sqrt{(2R_A)^2 + (2R_A)^2 + (2R_A)^2}$
- $A-K \rightarrow RD/2$
- Bedingung Berühren: $R_k + R_A \stackrel{!}{=} \frac{RD}{2}$

Abbildung 2: Skizze Ionenkristall

- In ionischen Kristallen mit $ZK = 8$ befindet sich das Kation in der Mitte eines Würfels, die Anionen an den Ecken.
- Die Raumdiagonale des Würfels ist $d = \sqrt{3}a = 2(R_k + R_a)$.
- Die Würfelkante ist $a = 2R_a \Rightarrow R_k = \left(\frac{\sqrt{3}-1}{2}\right)a$.
- Daraus ergibt sich:

$$\frac{R_k}{R_a} = \sqrt{3} - 1 \approx 0,732.$$

b) Packungsdichten für fcc und bcc:

- Die Packungsdichte ist definiert als $\eta = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{Zelle}}}$.

– **fcc-Struktur:**

- * 4 Atome pro Elementarzelle.
- * Kugeln berühren sich entlang der Flächendiagonale: $a = 2\sqrt{2}r$.
- * Zellvolumen: $V = a^3 = (2\sqrt{2}r)^3 = 16\sqrt{2}r^3$.
- * Atomvolumen: $4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{16}{3}\pi r^3$.
- * Packungsdichte:

$$\eta_{\text{fcc}} = \frac{\frac{16}{3}\pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74.$$

– **bcc-Struktur:**

- * 2 Atome pro Elementarzelle.
- * Kugeln berühren sich entlang der Raumdiagonale: $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$.
- * Zellvolumen: $V = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3$.
- * Atomvolumen: $2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{8}{3}\pi r^3$.
- * Packungsdichte:

$$\eta_{\text{bcc}} = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}}r^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0,68.$$

Aufgabe 5 – Polymerrechnung

a) Wiederholeinheit und molare Masse von PVAL:

– Wiederholeinheit: $-[CH_2CH(OH)]-$.

– Atommassen:

* C: 12,01 g/mol,

* H: 1,008 g/mol,

* O: 16,00 g/mol.

– Berechnung:

$$M_0 = 2 \cdot 12,01 + 4 \cdot 1,008 + 16,00 = 44,05 \text{ g/mol.}$$

b) Anzahl der Wiederholeinheiten N :

– Gegeben: $M = 10 \text{ kg/mol} = 10\,000 \text{ g/mol}$.

– Formel: $N = \frac{M}{M_0}$.

– Eingesetzt:

$$N = \frac{10\,000}{44,05} \approx 227.$$

– Ein solches PVAL-Molekül enthält ca. 227 Wiederholeinheiten.