

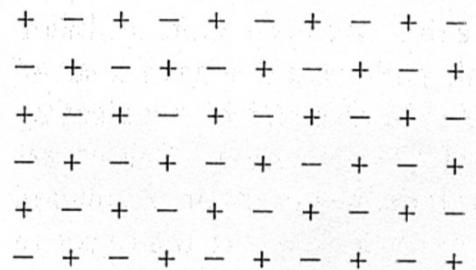
- Punktklasse + Translation  $\longrightarrow$  Raumgruppe  
 sphärische Basis: 7 = Kristallsysteme  
 nicht-sphärische Basis: 32
- 14 = Bravais Gitter  
 230

- Symmetrieeigenschaften

Inversion	$\bar{1}$
Drehung	1, 2, 3, 4, 6
Spiegelung	$m$

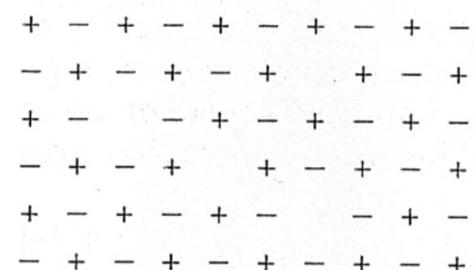
Drehinversion  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$   
 Drehspiegelung ( $S_h$ )
- Bravaisgitter (Kategorien) kubisch, tetragonal, rhombisch, monoklin, triklin  
 + rhomboedrisch, hexagonal (P, I, F, C)
- Konzentration von Punktefehlern:  $G = U - TS + pV$  (Phasenübergänge und T)  
 $n/N \sim e^{-E_g/k_B T}$
- Leerstellen, Zwischenatomgitter, Verunreinigungskatome

- Ionenkristalle: Leitfähigkeit durch Ionen, nicht durch  $e^-$   
Randbedingung Ladungsnutralität



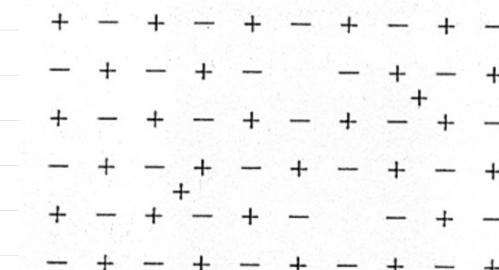
(a)

perfekter Ionenkristall



(b)

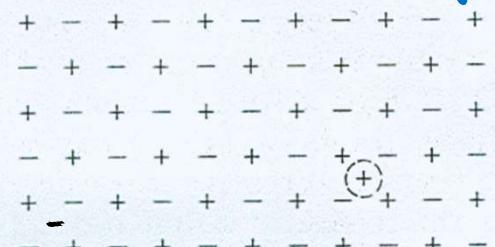
Schottky Defekte ( $\text{NaCl}$ )



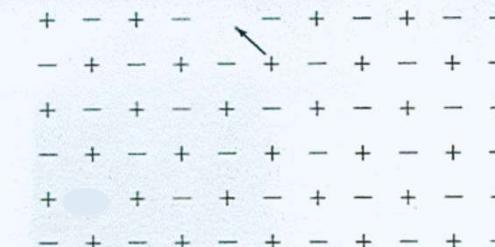
(c)

Frenkel Defekte ( $\text{AgBr}$ )

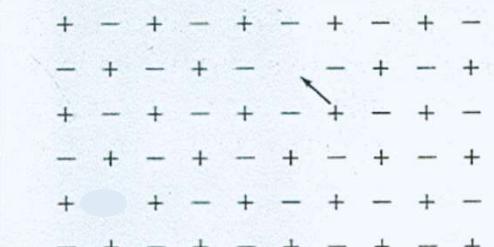
- Erhöhung der Leitfähigkeit durch Leerstellen:  
immobil, Coulombengru | immobil  $\rightarrow$



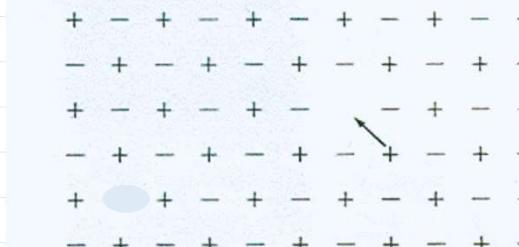
(a)



(b)



(c)



(d)

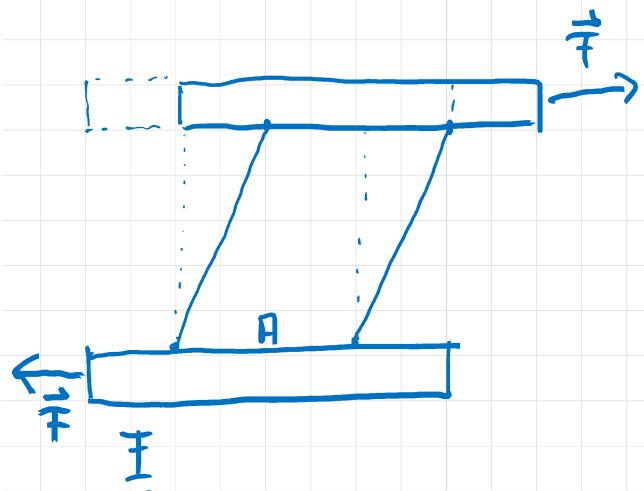
## 2.2 Versetzungen

Experiment: Verbiegung von Cu

- 1.) Hartes Cu ( wie gefest)
- 2.) Weiches Cu ( geglättet, langsam abkühlen)
- 3.) Wiederholt Biegen: Weiches Cu wird hart
- 4.) Bruch

Wie funktioniert plastische Verformung?

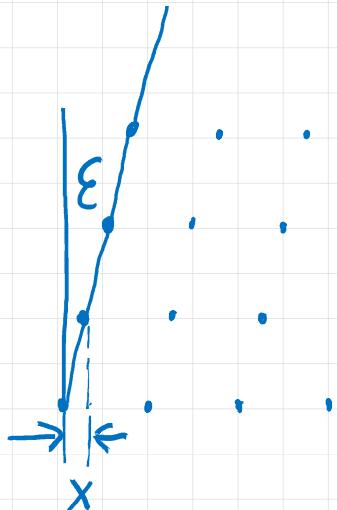
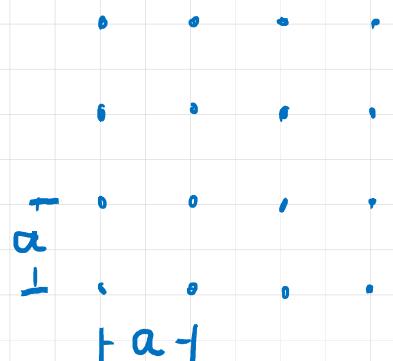
## ① Problem der kritischen Schubspannung



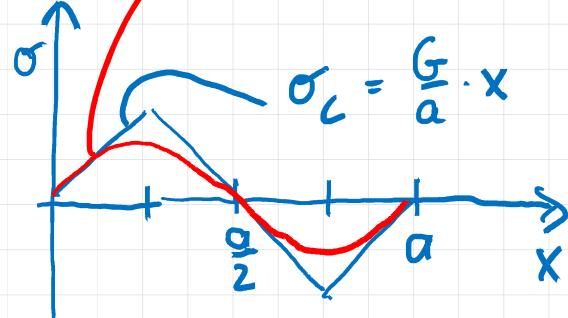
$$\sigma = G \cdot \varepsilon \approx G \cdot \frac{x}{a}$$

$\uparrow$   
Schubmodul

Wenn  $x = \frac{a}{2} \Rightarrow \sigma = 0 \Rightarrow \sigma_{\max} \text{ bei } \frac{a}{4}$



$$\sigma = \frac{G}{2\pi} \sin\left(2\pi \frac{x}{a}\right)$$



$$\text{denn } \varepsilon \text{ klein} \Rightarrow \tan \varepsilon = \frac{x}{a} \approx \varepsilon$$

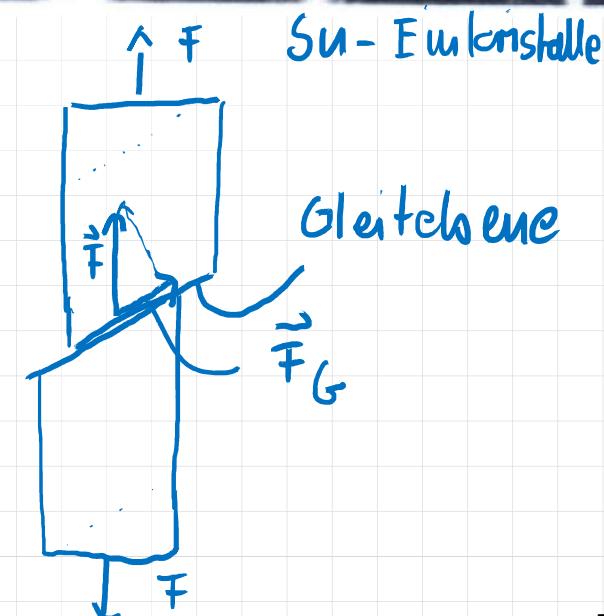
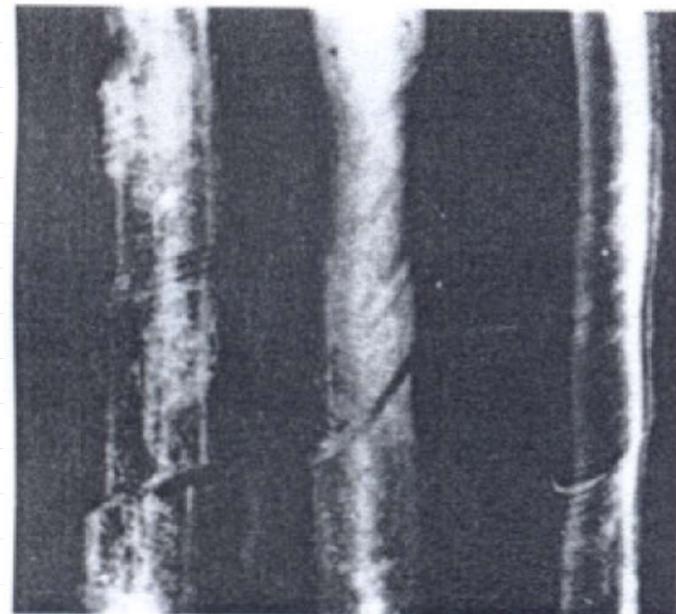
linear  $\sigma_c = G \cdot \frac{\frac{a}{4}}{a} = \frac{1}{4} G$

sinusf  $\sigma_c = \frac{G}{2\pi}$

## enorme Diskrepanz Modell - Messung : Paradoxen

Tabelle 21.1: Vergleich zwischen Schubmodul und Elastizitätsgrenze.

	Schubmodul $G$ in N/m <sup>2</sup>	Elastizitätsgrenze $\sigma_c$ in N/m <sup>2</sup>	$G/\sigma_c$
Sn, Einkristall	$1,9 \cdot 10^{10}$	$1,3 \cdot 10^6$	15 000
Ag, Einkristall	$2,8 \cdot 10^{10}$	$6 \cdot 10^5$	45 000
Al, Einkristall	$2,5 \cdot 10^{10}$	$4 \cdot 10^6$	60 000
Al, rein, polykristallin	$2,5 \cdot 10^{10}$	$2,6 \cdot 10^7$	900
Al, handelsüblich, gezogen	$\sim 2,5 \cdot 10^{10}$	$9,9 \cdot 10^7$	250
Duralumin	$\sim 2,5 \cdot 10^{10}$	$3,6 \cdot 10^8$	70
Fe, weich, polykristallin	$7,7 \cdot 10^{10}$	$1,5 \cdot 10^8$	500
Wärmebehandelter Flussstahl	$\sim 8 \cdot 10^{10}$	$6,5 \cdot 10^8$	120
Chromnickelstahl	$\sim 8 \cdot 10^{10}$	$1,2 \cdot 10^9$	65



② Plastische Verformung: durch Gleiten, dicht gepackte  
Kristallebenen scheren aneinander ab.

① und ② werden gelöst durch Liniendefekte in Kristallen: Versetzungen

• Stufenversetzung, operative Definition:

1.) Schneide mit „magischen“ Volterra Messer die Fläche ABCD auf

2.) Verschiebe die Fläche I zur Schmittkante um  $\vec{b}$

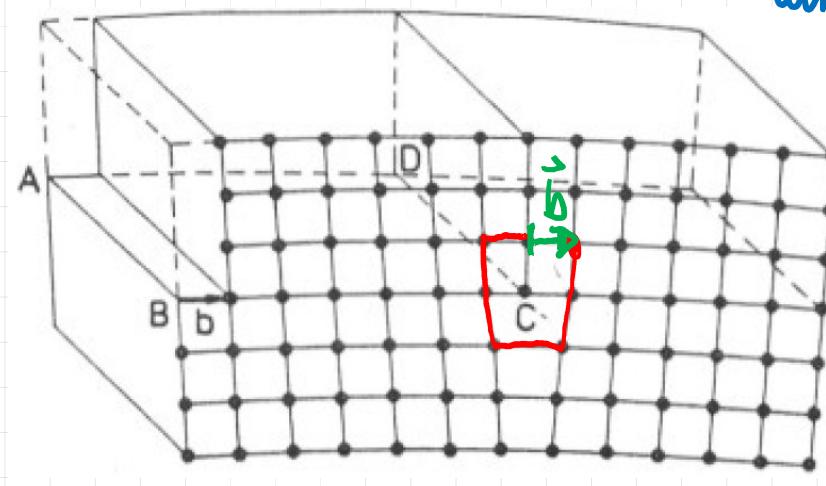
3.) Setze Kristall zusammen, relaxiere zu minimaler Energie

Linie CD ist die Versetzungslinie       $\vec{b} \perp$  auf Versetzungslinie

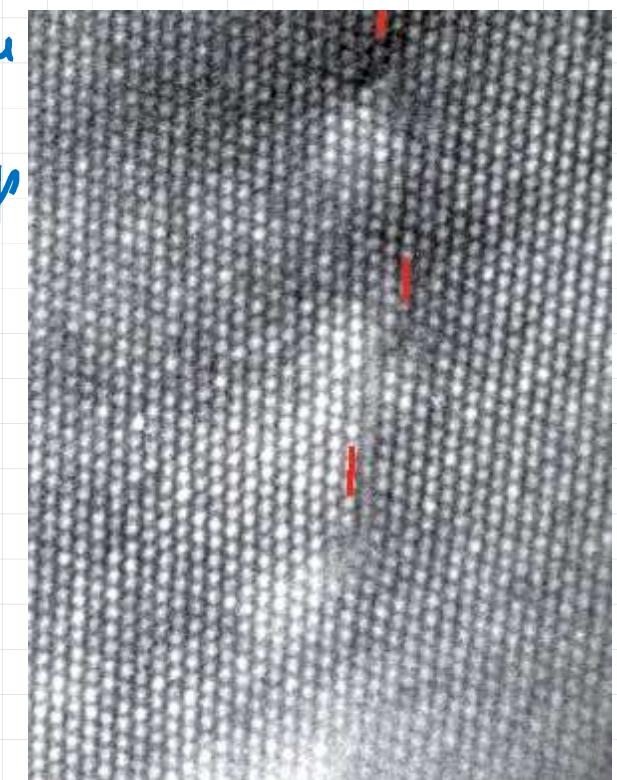
Der Vektor  $\vec{b}$  heißt

Burgers Vektor =

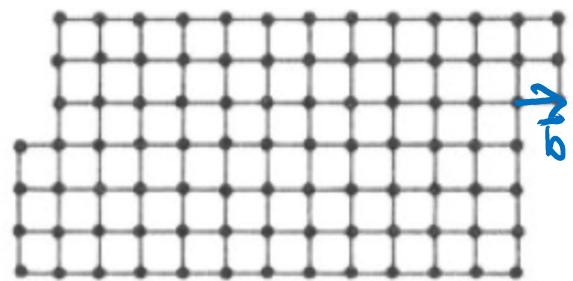
Schließungswinkel  
beim Umlauf um  
Versetzung



TEM-Bild von Stufenversetzungen

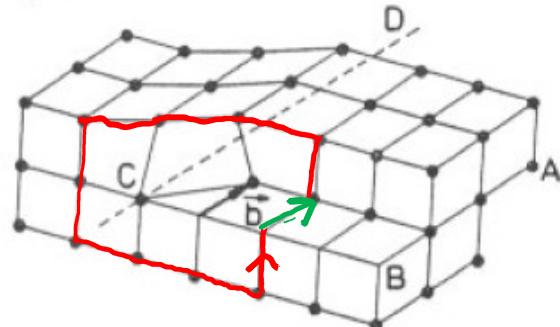


- Schubspannung in Richtung von  $\vec{b}$   $\Rightarrow$  Versetzungswanderung  $\Rightarrow$  plastische Verformung
- Versetzungen wandern nur auf Gleitebenen  
 $\Rightarrow$  erklärt ②
- $\sigma_c$  für Versetzungswanderung  $<$   $\sigma_c$  für Wanderung der ganzen Ebene  
 $\Rightarrow$  erklärt ①

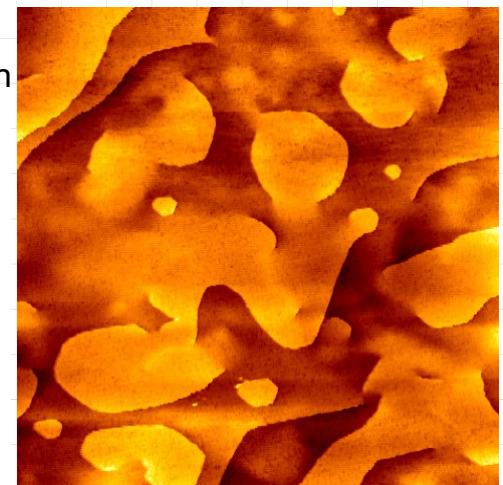


Versetzung wurde 1934 von Orowan, Polanyi und Taylor erfunden, vor exp. Beobachtung

- Schraubenversetzung  
analog Stufenversetzung, aber  
 $\vec{b} \parallel$  Versetzungslinie

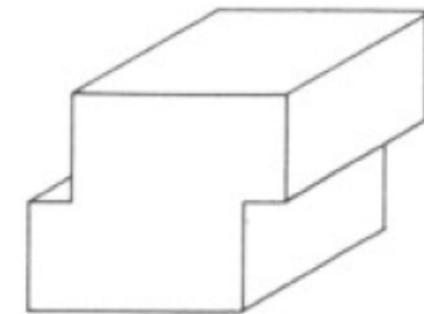
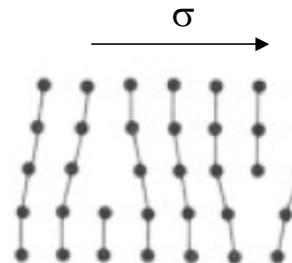
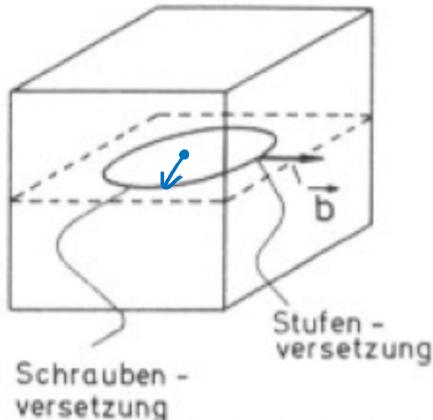


Durchstoßpunkte von Schraubenversetzungslien an Oberfläche, STM-Bild



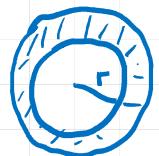
- allgemeine Versetzung:

1. aufschneiden
2. oberen Teil um  $\vec{b}$  verschieben
3. zusammenfügen
4. relaxieren



$\vec{b}$  in Ringe Ebene

ist die nur Vergrößerung von  $r$  auf  $r+b$ ? [Damit Gitter erhalten, muss infinitesimale Vergrößerung  $dr = b$ ]



$$W = A \cdot \sigma \cdot \underbrace{\frac{2\pi r b}{A} b}_{\Rightarrow} \Leftrightarrow$$

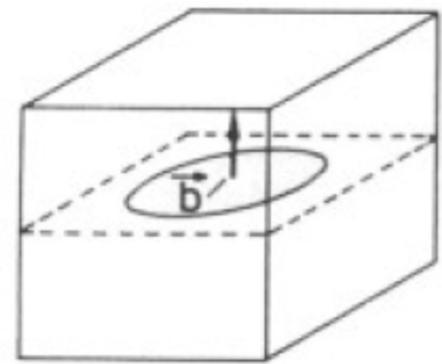
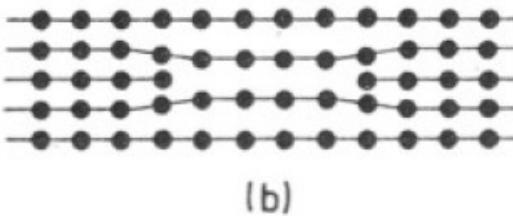
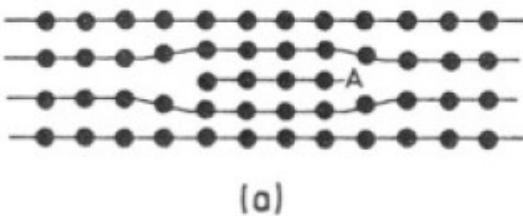
Fläche an der  $\sigma$  angreift

mittlere Verschiebung des oberen Kristalls

$$W = \sigma 2\pi r b^2$$

- allgemeine Versetzung,  $\vec{b} \perp$  Ringebene

1. ausschneiden
2. oberen Teil um  $\vec{b}$  verschieben



3. Material einfügen oder entfernen
- 4+5. zusammenfügen + relaxieren

- allgemeine Versetzung

1. ausschneiden auf beliebig gekrümmter Fläche
2. um  $\vec{b}$  verschieben
3. gegebenenfalls Material einfügen
4. zusammenfügen + relaxieren

$\vec{b} \perp$  Versetzungsring  $\Rightarrow$   
sesshafte Versetzung

## • elastische Energie einer Versetzung (für Schraubenversetzung)

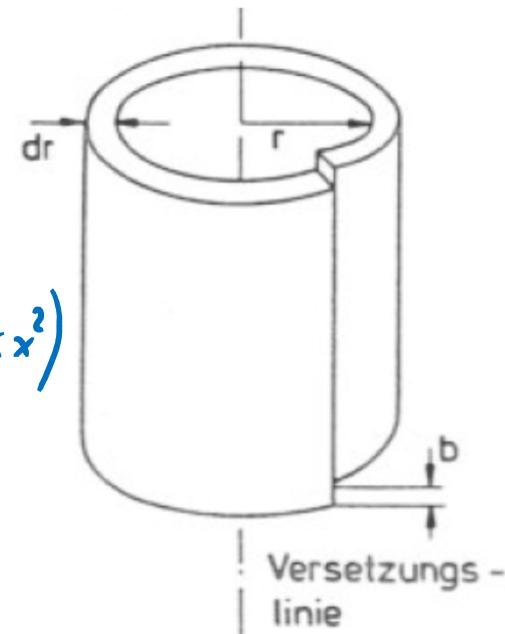
Für zylindrische rechts: Scherungswinkel  $\varepsilon = \frac{b}{2\pi r}$

$$\text{Elastische Energiedichte } \frac{1}{2} G \varepsilon^2 = \frac{1}{2} G \cdot \frac{b^2}{4\pi^2 r^2} \quad (E_{\text{feld}} = \frac{1}{2} k x^2)$$

Elastische Energiedichte der Zylinderschale

$$dU_{\text{el}} = \frac{Gb^2}{8\pi^2 r^2} \cdot 2\pi r \cdot L \cdot dr = \frac{Gb^2 L}{4\pi r} dr$$

$$\text{Integration } U_{\text{el}} = \int_{r_0}^{R_0} \frac{Gb^2 L}{4\pi r} dr = \frac{Gb^2 L}{4\pi} \ln \frac{R_0}{r_0} \quad (*)$$



- untere Grenze  $r_0$ : unmittelbare atomare Umgebung der Versetzungslinie  $r_0 \approx 6 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
- obere Grenze  $R_0$ : Ausdehnung des Kristalls  $R_0 \approx 10^{-2} \text{ m}$

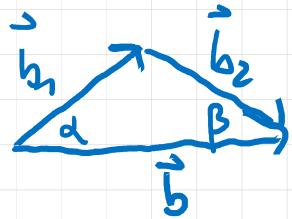
Für  $L \approx 3\text{ \AA}$  und  $b \approx 3\text{ \AA}$  (Gitterparameter  $3\text{ \AA}$ ),  $G = 5 \cdot 10^{10} \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$

$$\Rightarrow U_{\text{el}} \approx 11 \text{ eV/Atom}$$

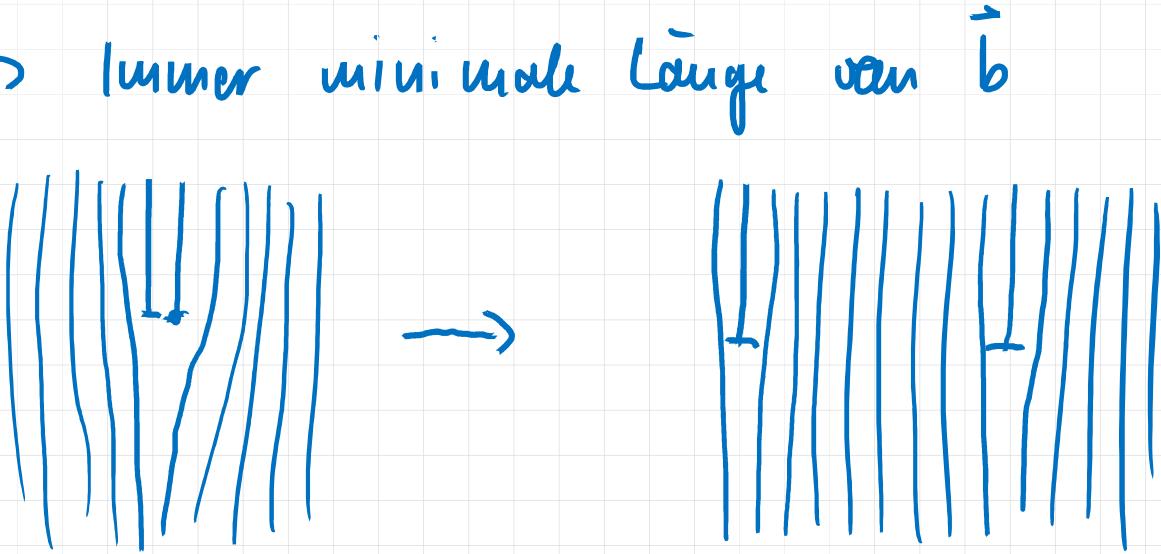
Energie ist vergleichbar (aber größer) mit Bindungsenergie von  $\approx 5 \text{ eV/Atom}$  im Kristall

Die Energie des Verzerrungskerns pro Atom ist  $\approx 1 \text{ eV}$

Laut (\*) ist  $U_{\text{el}} \sim b^2 \Rightarrow$  immer minimale Länge von  $\vec{b}$



$$\alpha + \beta < 90^\circ \Rightarrow b_1^2 + b_2^2 < b^2$$

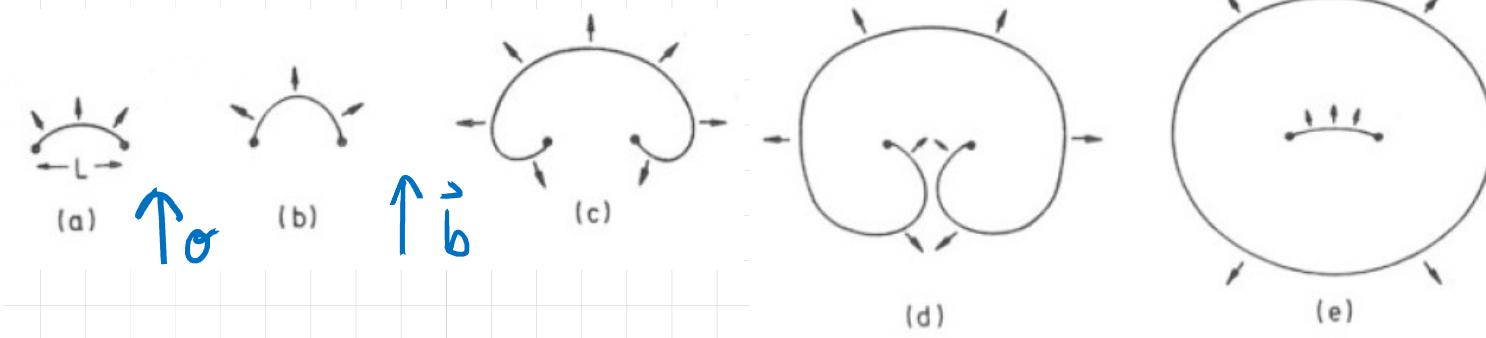


## Versetzungsquellen

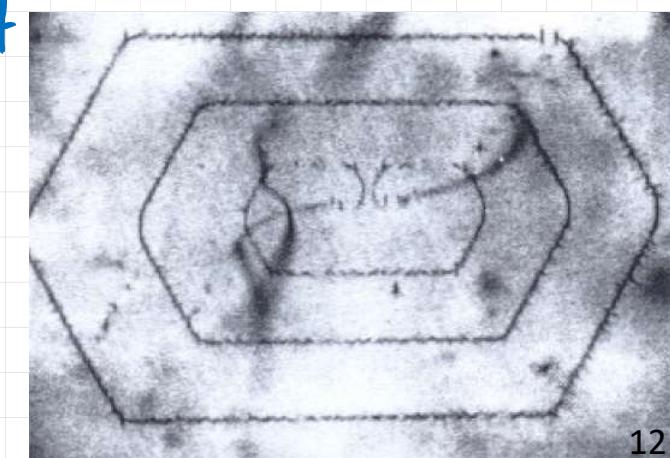
Versetzung hat wenig Konfigurationsentropie  $\Rightarrow$  ungleichgewicht Konz.  $\neq 0$

reale Kristalle enthalten Verr : Kondensation von Leerstellen in Versetzungsringe  $\rightarrow$  Versetzungsschwund erzeugt daraus glückselige Verr oder Versetzungsquellen.

Eine Frank - Read Quelle ist eine an nur 2 Punkten um Abstand L verankerte Versetzung, die unter dem Einfluß von  $\sigma$  in Richtung von  $\vec{b}$  Versetzungsringe erzeugt



Frank-Read Quelle in Si, mit Cu dekoriert, Infrarotmikroskopie



Wie groß muss  $\sigma$  sein, damit der Verdeckungsring wächst?  
 D.h. wie groß  $\sigma_c$  für Vergrößerung von  $R$  auf  $R+b$ ?

$$\frac{G \cdot b^2 \cdot 2\pi b}{4\pi} \ln \frac{R_0}{r_0} = \sigma_c \cdot 2\pi r b^2$$

Zuwachs an elastischer Energie

Arbeit der Schubspannung

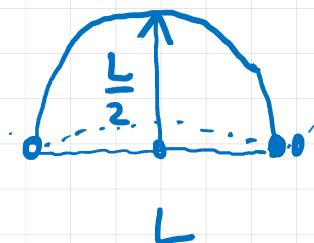
$$\ln \frac{R_0}{r_0} \cdot \frac{1}{4\pi} \approx 1 \Rightarrow$$

$$G \cdot b^2 \cdot 2\pi b \approx \sigma_c \cdot 2\pi r b^2 \Leftrightarrow$$

$$\sigma_c \approx \frac{G \cdot b}{r}$$

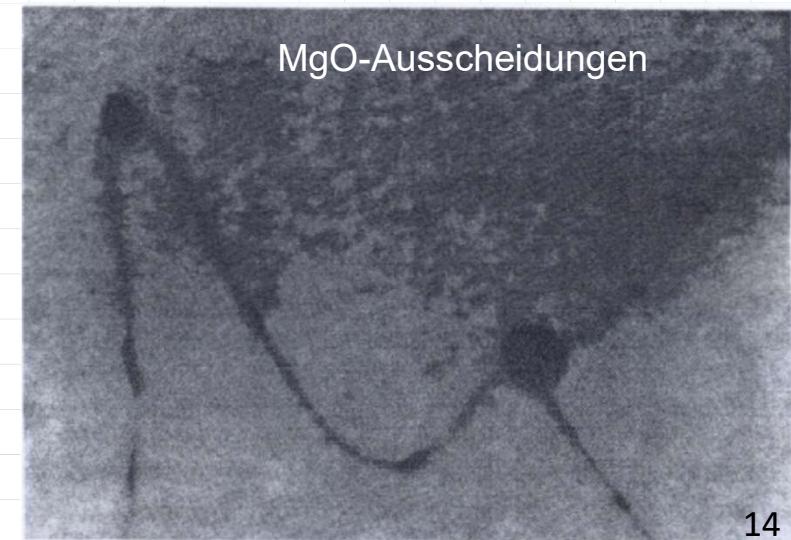
Für Frank Read Quelle ist min  $r = \frac{L}{2}$

$$\sigma_c \approx \frac{2G \cdot b}{L}$$



## Härtung von Materialien

- plastische Verformung erzeugt um mehr Versetzungen → Versetzungsbewegungen → Atomabstand L sinkt →  $\sigma_c$  steigt → Kaltverfestigung (work hardening) führt zur Versprödung
- durch Ausscheidung kleiner Teilchen einer anderen Phase, die die Versetzungsbewegung behindert.
- Durch Delokalisierung der Versetzungen mit Fremdatomen. Bei Ternern sammeln sich ein legierte Fremdatome im Versetzungsfeld der Verzerrung durch Diffusion. Bei tiefen T kann sich die Versetzung dann nicht mehr lösen
- Härtung von Fe beruht auf Martensitbildung (c)



## Erklärung des Experiments

hartes Kupfer: kalt verarbeitet

weiches Kupfer: geglättet (Versetzungslösen sich auf) und langsam abgekühlt.

wiederholtes Biegen von weichem Cu: immer mehr Ven, L wird kleiner → Härtung → Sprödbruch.

Keramik ist spröde und Metalle sind duktil

Die Versetzungsenergi in Keramiken ist aufgrund der gerichteten Bindungen sehr viel höher → keine Formbarkeit → direkter Bruch