

# Werkstoffkunde I Zusammenfassung

Diese Zusammenfassung für Werkstoffkunde I orientiert sich am seit dem Wintersemester 2008/09 verfügbaren neuen Skript von Prof. Dr. M. J. Hoffmann und Dr. S. Wagner (Kapitel 1 bis 7) sowie am alten Skript und meinen eigenen Vorlesungsmitschriften (Kapitel 8 und 9). Außerdem wurden für die Zusammenfassung auch die Vorlesungsfolien und die Übungen benutzt. Sie ist – wie der Name schon sagt – eine Zusammenfassung und keine wortgetreue und komplette Wiedergabe des Skripts und kann dieses unter keinen Umständen ersetzen, da sie nur das Wichtigste komprimiert enthält. Für das Lernen von Details wird weiterhin das Skript benötigt!

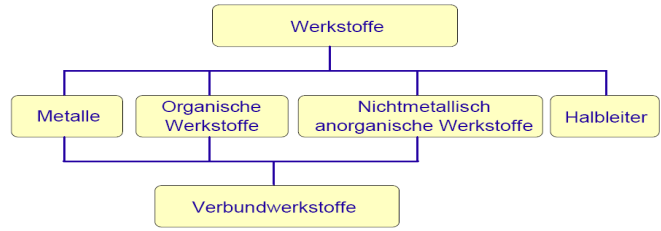
Nun hoffe ich, dass euch diese Zusammenfassung weiter hilft und wünsche euch viel Glück bei der Werkstoffkunde I Klausur!

1)	Einführung.....	2
1.1	Werkstoffgruppen	
1.2	Dimensionen in der Werkstoffkunde	
2)	Atomaufbau.....	3
2.1	Grundbegriffe	
2.2	Chemische Bindung	
3)	Kristallstrukturen.....	6
3.1	Kristallsysteme und Gittertypen	
3.2	Röntgenographische Untersuchungen an Kristallen	
3.3	Kristalline Elementstrukturen	
3.4	Kristalline Strukturen von Verbindungen	
3.5	Molekülstrukturen (Strukturen von Hochpolymeren)	
4)	Störungen in kristallinen Festkörperstrukturen (Kristallbaufehler).....	12
4.1	Punktdefekte (nulldimensionale Gitterstörungen)	
4.2	Versetzungen (eindimensionale Gitterstörungen)	
4.3	Zweidimensionale Kristallbaufehler	
4.4	Dreidimensionale Gitterstörungen	
5)	Mechanisches Verhalten.....	14
5.1	Allgemeines	
5.2	Linear-elastische Verformung	
5.3	Plastische Verformung	
5.4	Bildung und Wechselwirkung von Versetzungen	
5.5	Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Fremdatomen	
5.6	Bruch	
6)	Physikalische Eigenschaften.....	19
6.1	Elektrische Leitfähigkeit	
6.2	Wärmeleitfähigkeit	
6.3	Thermische Ausdehnung	
7)	Übergänge in den festen Zustand.....	21
7.1	Thermodynamische Grundlagen	
7.2	Übergang vom flüssigen in den festen Zustand	
8)	Zustandsdiagramme.....	22
8.1	Allgemeines	
8.2	Grundtypen der Zustandsdiagramme von Zweistoffsystemen	
9)	Reale Zustandsdiagramme.....	24
9.1	Eisen-Kohlenstoff-Diagramm	
10)	Formelsammlung.....	26

# 1) Einführung

## 1.1 Werkstoffgruppen

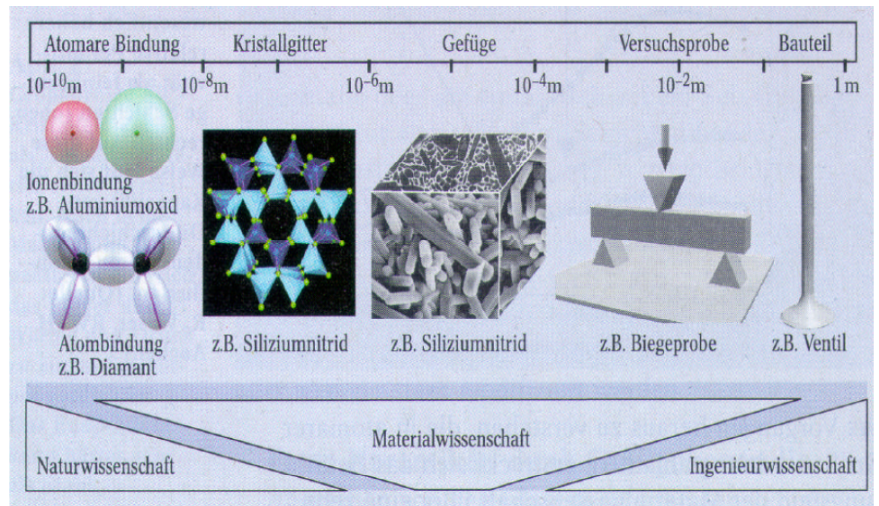
- Werkstoffe = grundsätzlich (außer Holz/Naturkautschuk) synthetisch hergestellte Materialien
- Verbundstoffe = bestehen aus 2 unterschiedlichen Materialien mit dem Ziel, die Vorteile beider zu verbinden



Metalle	Organische Werkstoffe	Nichtmetall.-anorganische Werkst.
Eisen (Legierungen: Stahl, Gusseisen), Alu-Legierungen, Titan-Legierungen	Aufbau aus: C, H, O, F, Si Holz, polymere Werkstoffe (Kunststoffe)	Aufbau aus: Al, Si, Ca, Na / C, N, O Gläser, Keramiken
Plastisch verformbar (duktil)	Gut verformbar, aber geringere Festigkeit/Steifigkeit wie Metalle	Plastisch nicht verformbar (spröde)
Hohe elektrische/thermische Leitfähigkeit	Geringe elektrische/thermische Leitfähigkeit (gute Isolatoren)	Geringe elektrische/thermische Leitfähigkeit (in der Regel)
Geringe chemische Resistenz in vielen Medien (z.B. Rostbildung bei Eisen)	Gute chemische Resistenz	Chemisch und thermisch sehr resistent (Schmelztemp. $Al_2O_3$ : 2050°C)
Lichtundurchlässig (Licht wird reflektiert)	Kunststoffe: Vorteil: geringe Kosten / Nachteil: schweres Recycling (unzureichende Qualität) Alterung (z.B. Versprödung) Viele verschiedene Eigenschaften und Einsatzgebiete je nach Material	Bestehen aus positiven Metall- und negativen Nichtmetall-Ionen Sauerstoff + Metall = Oxid Stickstoff + Metall = Nitrid Kohlenstoff + Metall = Carbid

## 1.2 Dimensionen in der Werkstoffkunde

- Mikrostruktur eines Bauteils ist verantwortlich für makroskopische Eigenschaften (Anordnung der Atome, Art der Bindung zwischen den Atomen, Gefüge im  $\mu\text{m}$ -Bereich)
- Materialwissenschaft: Brückenglied zwischen Natur- und Ingenieurwissenschaften; beschreibt den Zusammenhang zwischen Struktur im atomaren mm-Bereich, im mikroskopischen  $\mu\text{m}$ -Bereich und im makroskopischen mm- bis m-Bereich)

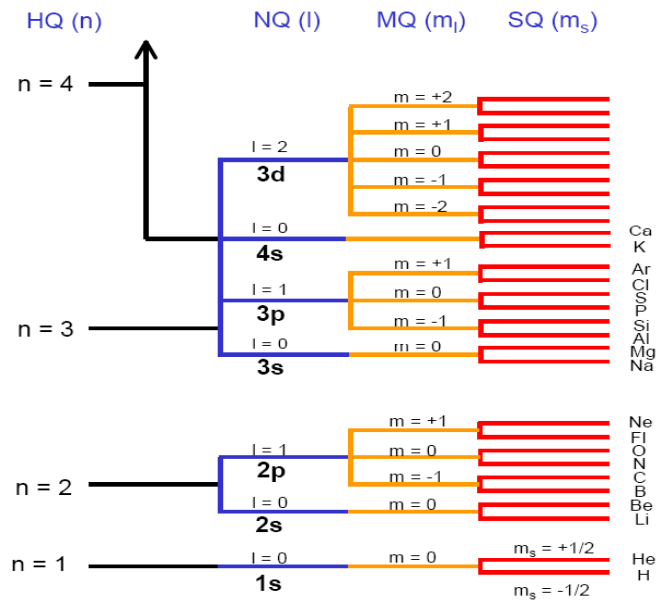


## 2) Atomaufbau

### 2.1 Grundbegriffe

- Atome bestehen aus Atomkern (Protonen, Neutronen) und Elektronenhülle (diskrete Energieniveaus)
- Ein Element des Periodensystems der Elemente (PSE) besteht aus Atomen, die alle die gleiche Anzahl von Protonen und Elektronen aufweisen (X: Elementsymbol, M: Massenzahl, Z: Ordnungszahl im PSE und Anzahl der Protonen im Kern)  $\begin{matrix} M \\ Z \\ X \end{matrix}$
- Reinelemente bestehen nur aus einer Atomsorte, Anzahl Protonen und Elektronen ist gleich; Isotope sind Reinelemente mit unterschiedlich vielen Neutronen
- Atomkern trägt gesamte Masse und bestimmt Dichte, ist aber nur sehr klein.
- Die meisten anderen Eigenschaften bestimmt die Atomhülle.

- Quantenmechanik: Hülle = System von erlaubten Energieniveaus für Elektronen (Schema: 4 Quantenzahlen)
- Hauptquantenzahl ( $n = 1$  bis  $7$ ) bestimmt Hauptenergieniveau der Elektronen
- Nebenquantenzahl ( $l = 0$  bis  $n-1$ ) kennzeichnet räumliche Verteilung der Ladung des Elektrons (Aussage über die Form von Orbitalen) (s,p,d,f-Elektronen)
- Magnetquantenzahl ( $m_l = -1, 0, 1$ ) bestimmt Verhalten des Elektrons im magnetischen Feld
- Spinquantenzahl ( $m_s = -1/2, +1/2$ ) = mechanischer Drehimpuls des Elektrons (im/gegen Uhrzeigersinn)
- Z.B. Natrium:  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$
- Nummer der Hauptgruppe (Spalte) gibt Anzahl der Außenelektronen an
- Nummer der Periode (Zeile) gibt Anzahl der Hauptquantenzahl an



Spalte	Gruppe
1	Alkalimetalle
2	Erdalkalimetalle
3	Erdmetalle
4	C-Gruppe
5	N-Gruppe
6	Chalkogene
7	Halogene
8	Edelgase

IA												VIII						0																	
1	2	3		4		5	6	7	8	9	10	11	12	VIII						13	14	15	16	17	18										
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
1,008	4,003	6,941	9,012	10,81	12,01	14,01	16,00	19,00	20,18	22,99	24,31	26,98	28,09	30,97	32,06	35,45	39,95	39,10	40,08	44,96	47,90	50,94	52,00	54,94	55,85	58,93	58,71	63,55	65,38	69,72	72,59	74,92	78,96	79,90	83,80
87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	132,91	137,33	138,91	178,49	180,95	183,85	186,2	190,2	192,22	195,09	196,97	200,59	204,37	207,2	208,98	(210)	(210)	(222)
Fr	Ra	Ac	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																			
(223)	(226,03)	(227)	140,12	140,91	144,24	(145)	150,4	151,96	157,25	158,93	162,50	164,93	167,26	168,93	173,04	174,97																			
			232,04	231,04	238,03	237,05	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(254)	(257)	(258)	(259)	(260)																			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw																			

- In der 4. Periode werden zunächst 4s-Elektronen besetzt, dann erst 3d-Elektronen (Nebengruppen)
- Gleiches gilt für die 5. Periode.

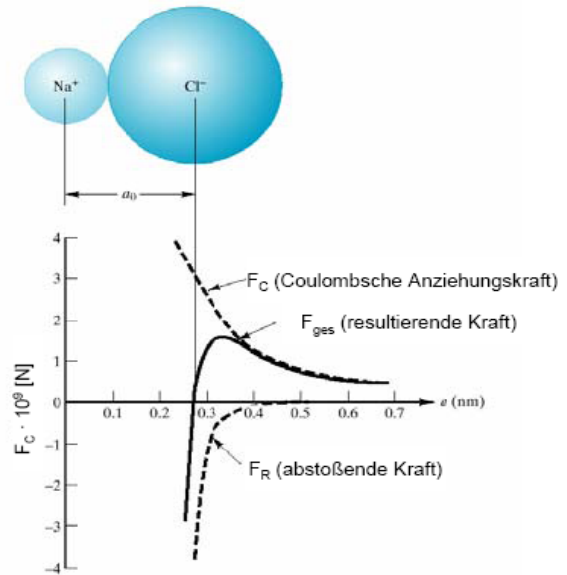
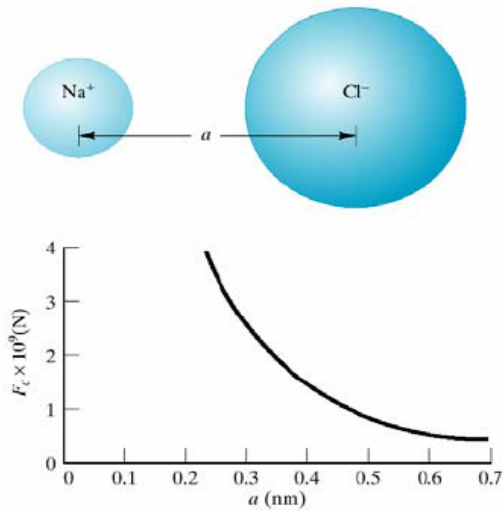
Lanthaniden

Actiniden

- Lanthanide/Actinide: Besetzung der f-Elektronen (Einreihung zwischen Lanthan und Hafnium bzw. nach Actinium)

## 2.2 Chemische Bindung

- Ionenbindung: Elektronentransfer zwischen zwei Elementen; Entstehung eines positiven Kations und eines negativen Anions. Der Bindungsmechanismus beruht bei der Ionenbindung im Wesentlichen auf der Coulombschen Anziehungskraft  $F_C$  von entgegengesetzt geladenen Ionen. Gleichzeitig wirkt jeder die Abstoßungskraft  $F_R$  der Ionen; mit sinkendem Abstand stoßen sich die Elektronenhülle der beiden Ionen immer stärker ab. Resultierende Kraft:  $F_{Ges} = F_C + F_R$



### Coulombsche Anziehungskraft zwischen 2 Ionen

Bei  $a_0$  ( $F_R = F_C$ ) durchläuft Energiekurve ein Minimum → Punkt stellt Gleichgewichtslage eines Ions dar → Gleichgewichtspunkt (Ionen können durch Energiezufuhr aus GG-Punkt entfernt werden)

### Resultierende $F_{Ges}$ sowie $F_R$ und $F_C$

$$0 < r_K / r_A < 0,155$$



$$0,155 < r_K / r_A < 0,225$$



### Tetraeder (KOZ=4)

$$0,225 < r_K / r_A < 0,414$$



### Oktaeder (KOZ=6)

$$0,414 < r_K / r_A < 0,73$$

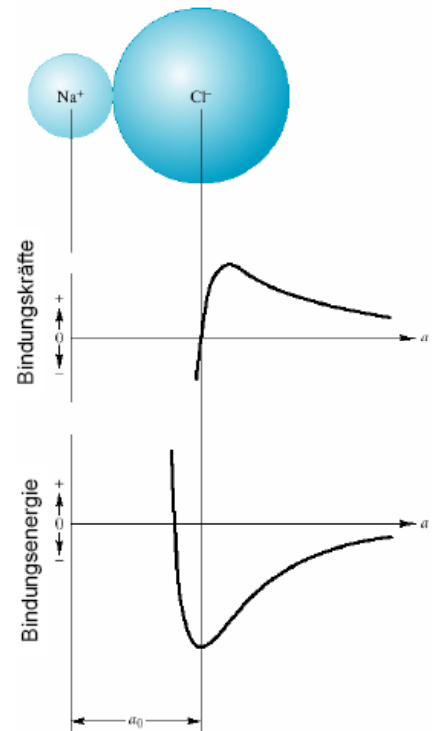


### Hexaeder (KOZ=8)

$$0,732 < r_K / r_A < 1$$



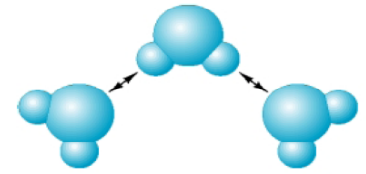
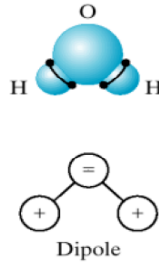
### Koordinationspolyeder



Koordinationszahl (KOZ) für Ionenkristalle kennzeichnet die Packungsdichte kristalliner Körper, gibt an, wie viele Nachbarn gleichen Abstandes ein Atom hat (Radienverhältnis:  $R_{Kation} / R_{Anion}$ )

- Atomare Bindung (kovalente Bindung): entsteht durch Überlappung der Orbitale der Valenzelektronen, sodass gemeinsame Elektronenpaare entstehen. Dabei besitzen die beteiligten Atome eine geringe Elektronegativitätsdichte und die gleiche Wertigkeit. Typisches Beispiel: Diamant: Grundzustand  $1s^2, 2s^2, 2p^2$ , dann  $sp^3$ -Hybridisierung (ein Elektron geht vom  $2s$ -Orbital zum  $2p$ -Orbital), dann neue Konfiguration:  $1s^2, 2s^1, 2p_x^1 p_y^1 p_z^1$  und somit 4 nicht voll besetzte Orbitale, was zur Ausbildung eines Kohlenstofftetraeders führt (extrem starke Bindung!)

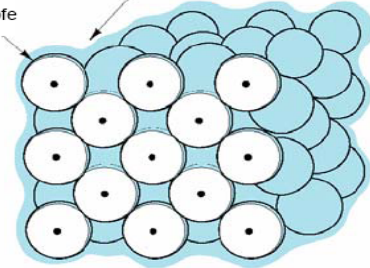
- Van der Waals Bindung: Van der Waals Kräfte sind schwache Kräfte, die auf der Wechselwirkung zwischen induzierten und permanenten Dipolen basieren (Bsp. Wasserstoffbrückenbindung zwischen 2 Wassermolekülen, da im Wassermolekül die Ladung nicht gleichmäßig verteilt ist → Dipole treten miteinander in Wechselwirkung)



Anziehungskräfte zwischen zwei Dipole!  
Elektronenwolke aus Valenzelektronen

- Metallbindung: Einzelne Atome des Kristalls geben ihre Valenzelektronen ab. Es entstehen positive Atomrümpfe, die von einer Elektronengaswolke umgeben sind → freie Elektronen sehr gut für thermische und elektrische Leitfähigkeit und verleihen metallischen Glanz

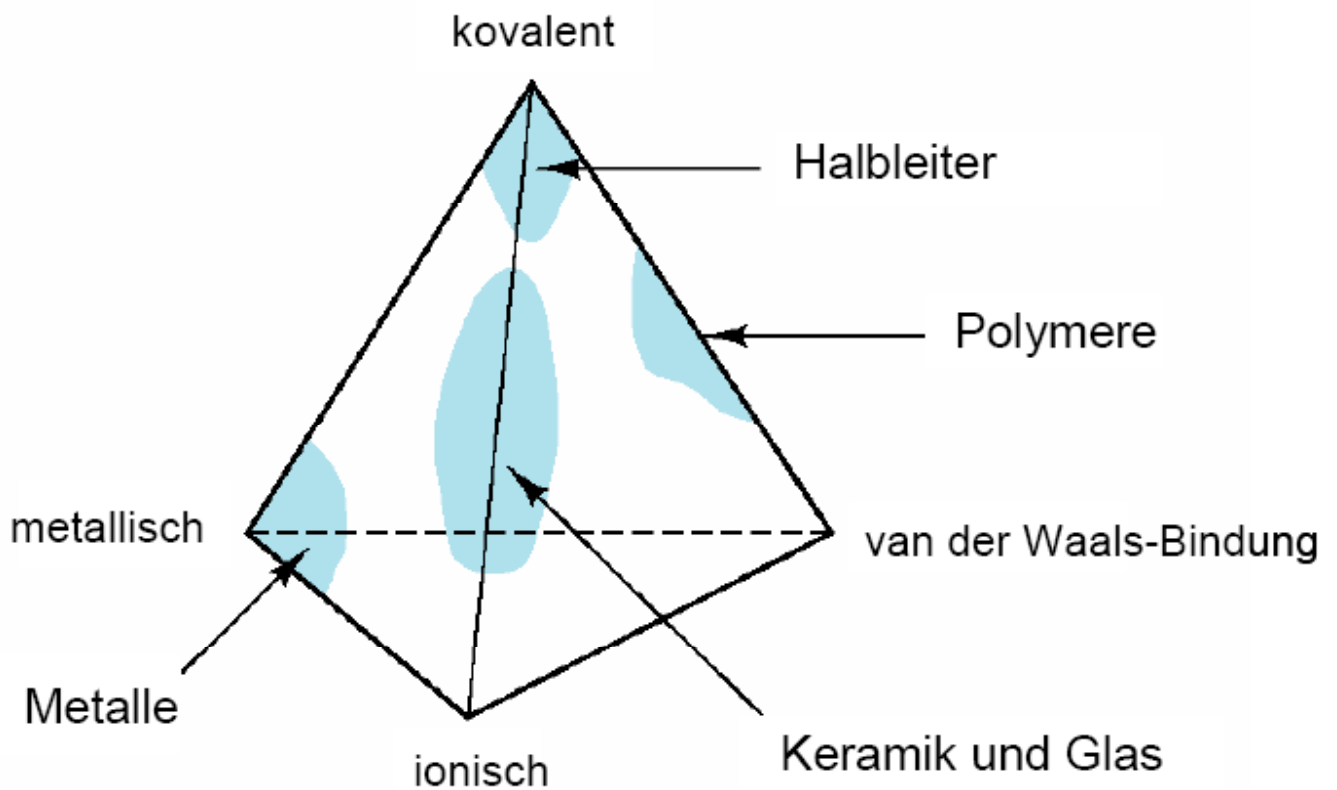
Cu<sup>2+</sup> Atomrümpfe



Schematische Darstellung der Atombindung

Atomrümpfe sind in einer dichten Kugelpackung gepackt und haben alle die gleiche Ladung. Werden die Atomebenen gegeneinander verschoben, bleiben bei der Metallbindung die Bindungskräfte erhalten, daher kommt die gute plastische Verformbarkeit. Bei ionisch gebundenen Stoffen hingegen werden durch eine Verschiebung die Anziehungskräfte der Ionen überwunden und es kommt zur Abstoßung, sodass die Bindung zerstört ist (→ spröde).

- Bindungstetraeder

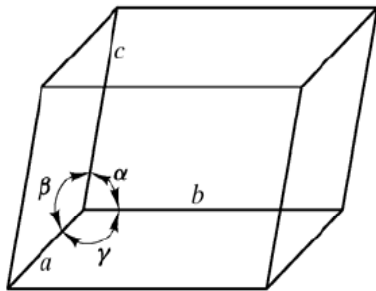


Bindungstetraeder

### 3) Kristallstrukturen

#### 3.1 Kristallsysteme und Gittertypen

- Kristalle = Grundbausteine vieler Materialien. Mechanische und physikalische Eigenschaften hängen von der Kristallstruktur ab. Kristalle sind umso stabiler, je dichter ihre Atompackung ist.
- ALLE Kristallstrukturen können geordnet werden in 7 Kristallsysteme und 14 Bravaisgittertypen



Elementarzelle

kubisch:	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
hexagonal:	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
rhomboedrisch:	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
tetragonal:	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch:	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoklin:	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \beta \neq 90^\circ$
triklin:	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$

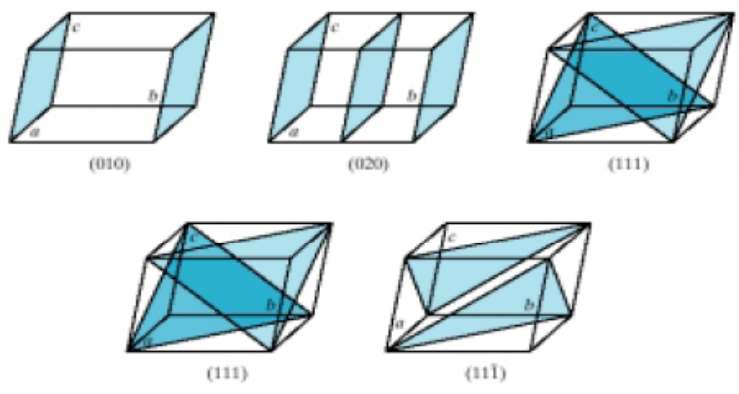
	Primitiv (P)	Innenzentriert (I)	Flächenzentriert (F)	
kubisch				
hexagonal		Hinweis: Die eingezeichnete rote Zelle entspricht einem Drittel der hexagonalen Zelle.		
rhomboedrisch	Hexagonal Rhomboedrisch (P) 	Rhomboedrisch (R) 		
tetragonal	Primitiv (P) 	Innenzentriert (I) 		
orthorhombisch	Primitiv (P) 	C-Basisflächenzentriert 	Innenzentriert (I) 	Flächenzentriert (F) 
monoklin	Primitiv (P) 	C-Basisflächenzentriert 		
triklin	Primitiv (P) 			

- **Gitterpunkte:** Jede Position eines Atoms in einer Elementarzelle (EZ) kann durch Gitterpunkte  $uvw$  beschrieben werden (Vektor  $\vec{r}$  siehe rechts)
- **Gittergeraden** (auch Gitterrichtung) werden durch den Koordinatenursprung  $000$  und den Vektor zu einem Punkt festgelegt. Eine Gerade wird mit  $[uvw]$  bezeichnet und ist unendlich. Negative Richtung: ein Strich über dem Buchstaben. Äquivalente Gittergerade: alle gleichwertigen Richtungen einer Elementarzelle; werden zusammengefasst als z.B.  $\langle 111 \rangle$  (Raumdiagonalen) oder  $\langle 110 \rangle$  (Flächendiagonalen)

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \rightarrow [uvw]$$

Vektor Gittergerade

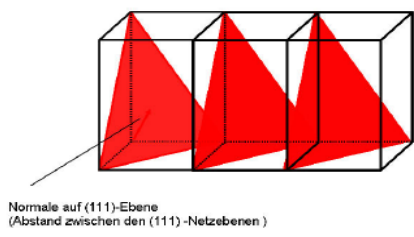
- **Gitterebenen:** Durch Gitterpunkte im Kristallgitter können Gitterebenen (Netzebenen) aufgespannt werden. Die Lage der Netzebenen wird über die Millerschen Indices  $(hkl)$  definiert: Bilde Schnittpunkte mit den Ebenen  $00a$ ,  $0b0$ ,  $c00$  und ermittle Länge der Achsenabschnitte  $ma$ ,  $nb$ ,  $pc$  bis zum Ursprung. Bilde  $1/m$ ,  $1/n$ ,  $1/p$  und wähle danach das kleinste gemeinsame Vielfache  $\rightarrow$  Ebene  $(hkl)$



Äquivalente Gitterebenen: Netzebenen, deren Indices sich nur durch ihr Vorzeichen oder ihre Reihenfolge in der Klammer unterscheiden, sind gleichwertige Netzebenen und werden zusammengefasst als z.B.  $\{100\}$  (Seitenflächen eines Würfels)

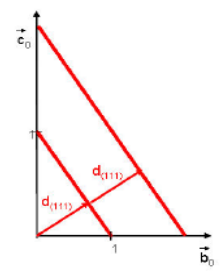
### 3.2 Röntgenographische Untersuchungen an Kristallen

- **Netzebenenabstand  $d$ :** Der kleinste Abstand zwischen zwei nächstbenachbarten Netzebenen der gleichen Netzebenenschar wird als Netzebenenabstand  $d_{(hkl)}$  bezeichnet. Eine Netzebenenschar umfasst dabei alle Netzebenen, die parallel zu einer bestimmten Netzebene verlaufen. Der Netzebenenabstand kann mit Hilfe von Röntgenstrahlung analysiert werden. Die Röntgenstrahlung (X-Strahlung) ist deshalb für die Analyse geeignet, da ihre Wellenlänge im Bereich 1 nm liegt, was der Größenordnung der Gitterparameter der Elementarzelle entspricht.



Normale auf (111)-Ebene (Abstand zwischen den (111)-Netzebenen)

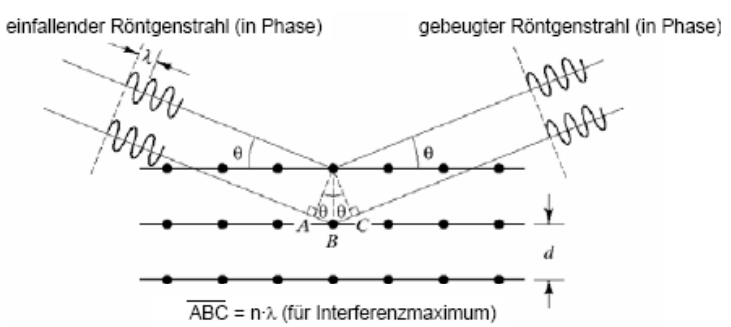
Definition des Netzebenenabstandes  $d_{(111)}$  einer Netzebenenschar



Projektion auf die bc-Ebene

Projektion des  $d_{(111)}$  auf die bc-Ebene (Normale auf (111))

- **Beugung von Röntgenstrahlen:** Wird ein Material mit Röntgenstrahlung beschossen, können dessen Elektronen zu Schwingungen angeregt werden und so selbst zur Quelle einer Strahlung werden, die die gleiche Wellenlänge besitzt wie die einfallende Strahlung (kohärente Strahlung). Treffen nun parallele Röntgenstrahlen, die in Phase schwingen, unter einem bestimmten Winkel  $\theta$  auf die mit Atomen besetzten Netzebenen (Atomreihen) auf, so werden sie reflektiert.

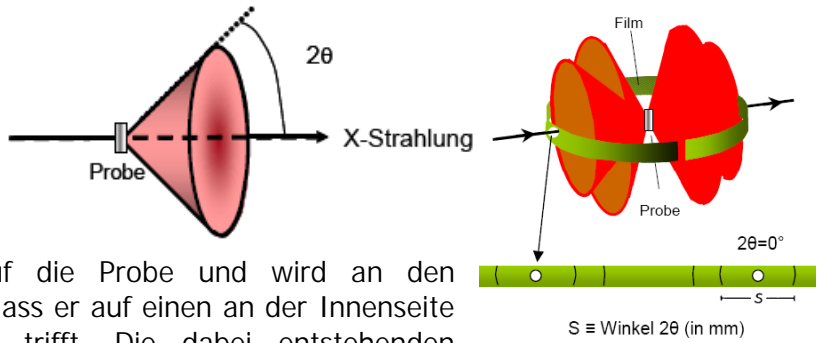


Es gilt:  $\overline{AB} = \overline{BC} = d \cdot \sin\theta$

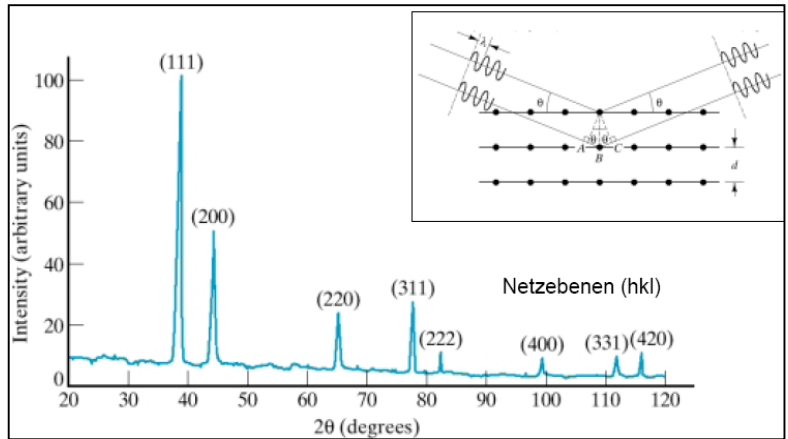
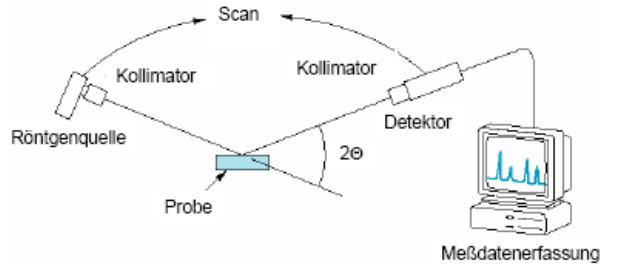
Dabei gilt: Strecke  $AB =$  Strecke  $BC = 2d \cdot \sin\theta$  und für die Wegdifferenz  $\Delta$  zwischen den beiden reflektierten Wellen  $\Delta = 2BC = 2d \cdot \sin\theta$  und (da die reflektierten Wellen nur dann in Phase schwingen, wenn der Weglängenunterschied  $\Delta$  ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge beträgt)  $2d \cdot \sin\theta = n \cdot \lambda$  (Bragg'sche Gleichung). Diese Gleichung gibt es auch nach einigen Umformungen auch für rechtwinklige Systeme in quadratischer Form (siehe rechts).

$$\left( \frac{h^2}{a_0^2} + \frac{k^2}{b_0^2} + \frac{l^2}{c_0^2} \right) \cdot d^2 = 1$$

- **Das Debye-Scherrer-Verfahren** war lange Zeit das gebräuchteste Verfahren zur Untersuchung kristalliner Pulver. Eine stäbchenförmige Probe, die sich in einer zylindrischen Kamera befindet, wird mit monochromatischer Röntgenstrahlung bestrahlt. Der Strahl gelangt durch ein Blendensystem auf die Probe und wird an den verschiedenen Netzebenen gebeugt, sodass er auf einen an der Innenseite der Kamera kreisrunden Röntgenfilm trifft. Die dabei entstehenden Beugungskegel werden auf dem Film in Form verschieden stark gekrümmter Linien abgebildet.



- **Das Zählrohrdiffraktometerverfahren** benutzt statt des Films ein Zählrohr. Eine ebene Probe befindet sich dabei in der Mitte eines Messkreises. Die Röntgenröhre und der Detektor befinden sich auf dem Umfang dieses fiktiven Messkreises. Während der Messung wird die Probe um den Winkel  $\Theta$  gedreht, der Detektor bewegt sich mit doppelter Winkelgeschwindigkeit  $2\Theta$  ( $\Theta$ - $2\Theta$ -Diffraktometer) und registriert die reflektierten Röntgenstrahlen. Ergebnis der Messung ist ein Röntgenspektrum, in welchem die Intensität der reflektierten Strahlung in Abhängigkeit des Beugungswinkels  $2\Theta$  aufgezeichnet ist. Die Peaks sind charakteristisch für eine bestimmte Netzebene. Jeder kristalline Stoff weist ein charakteristisches Röntgenspektrum auf, das die Identifizierung des Stoffes ermöglicht. Aus den Daten lassen sich außerdem die Netzebenenabstände sowie die Gitterkonstanten berechnen ( $\text{\AA}$  Bestimmung unbekannter Substanzen über ASTM-Kartei).



### 3.3 Kristalline Elementstrukturen

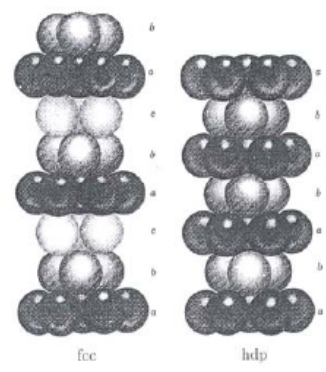
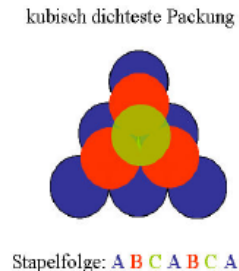
- Häufige Gittertypen: 75 % aller Elemente sind Metalle und 90 % aller Metalle kristallisieren im kubisch flächenzentrierten (kfz), kubisch raumzentrierten (krz) oder hexagonalen Gitter.

kubisch flächenzentriert (kfz)	kubisch raumzentriert (krz)	hexagonal (hdP)
$\gamma$ -Fe	$\alpha$ -Fe	Zn
Al	Cr	Cd
Cu	Mo	Co
Ni	W	Zr
Au	Nb	Hf
Ag	Ta	

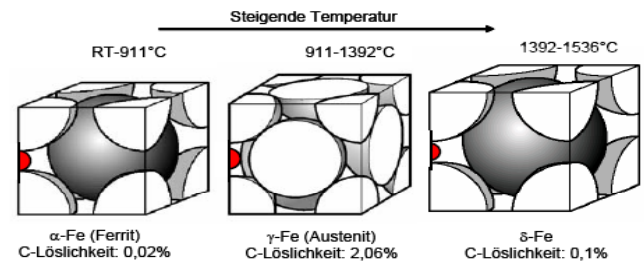
- Allgemeines über Gitter: Atome sind in einer EZ stets so gepackt, dass die maximal mögliche Packungsdichte erreicht wird, d.h. bestimmte Atome berühren sich. Zwischen Atomen Lücken: Tetraederlücken, Oktaederlücken, Hexaederlücken  $\rightarrow$  potenzieller Platz für andere Atome
- Kubisch primitives Gitter (Packungsdichte: 52 %): alle 8 Ecken eines Würfels sind mit Atomen besetzt. An jeder Ecke treffen jeweils 8 Elementarzellen aufeinander  $\rightarrow$  Eckenatom gehört jedem Atom zu 1/8  $\rightarrow$  Pro EZ: 1 Atom, 1 hexaedrische Lücke in der Mitte, 3 quadratisch planare Lücken in der Mitte der Würfelflächen, Seitenlänge  $a = 2r$
- Kubisch raumzentriertes Gitter (68 %): Neben den 8 Eckatomen auch die Mitte mit 1 Atom besetzt  $\rightarrow$  Pro EZ: 2 Atome, 12 verzerrte Tetraederlücken, 6 Oktaederlücken, Seitenlänge:  $a = 4r/\sqrt{3}$
- Kubisch flächenzentriertes Gitter (74 % = kubisch dichteste Packung, maximal mögliche Packungsdichte): Neben den 8 Eckatomen 6 Atome auf den Seiten  $\rightarrow$  Pro EZ: 4 Atome, 8 Tetraederlücken, 4 Oktaederlücken, Seitenlänge:  $a = 4r/\sqrt{2}$  (Allg. Regel für die Anzahl der Lücken bei dichtester Kugelpackung: Tetraederlücken = 2 \* Atome, Oktaederlücken = Atome) (Bei der kubisch dichtesten Packung beträgt die Stapelfolge mehrerer (111)-Ebenen ( = Ebene mit der höchsten Packungsdichte) ABCABC)



- Hexagonal dichteste Kugelpackung (hdp, 74 %): kann als Prisma mit regelmäßigem Sechseck als Basisfläche beschrieben werden → Pro EZ: 2 Atome (Stapelfolge im Gegensatz zur kdP ABABAB, d.h. die Atome der darüber- und darunter liegenden Schicht ordnen sich in die Zwickel der dazwischen liegenden mittleren Schicht ein (siehe rechts))

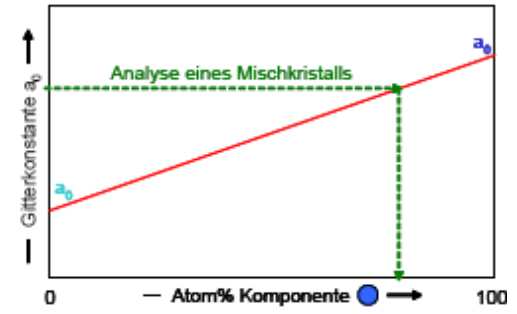
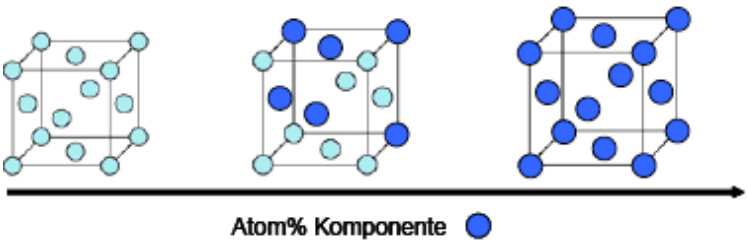
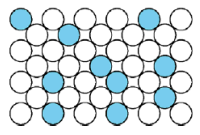


- Allotrope Elementmodifikationen (Polymorphie): Die Kristallstruktur eines Elementes ist abhängig von seiner Umgebungsbedingungen wie Druck und Temperatur. Ein typisches Beispiel dafür ist die polymorphe Umwandlung des Eisens (siehe rechts, alle Temperaturen gelten bei Normaldruckbedingungen).



### 3.4 Kristalline Strukturen von Verbindungen

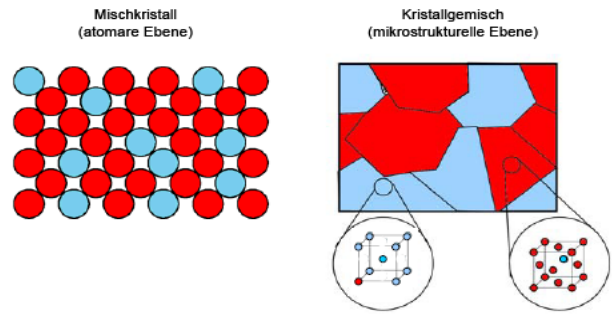
- Legierungsstrukturen: viele technisch genutzte Metalle sind „verunreinigte“ Legierungen mit geringen bis wesentlichen Gehalten an Fremdelementen
- Substitutionsmischkristalle: auf den regulären Gitterplätzen des Kristall werden Fremdatome eingebaut, d.h. es erfolgt ein „Austausch“ von Atomen; Substitution unbegrenzt möglich (siehe links) → vollständige Mischbarkeit (lückenlose Mischkristallreihe, z.B. Kupfer-Nickel oder Silber-Palladium); Substitutionsmischkristall nur möglich, wenn beide Materialien im gleichen Strukturtyp kristallisieren, die Atomradien sich um nicht mehr als 15 % unterscheiden und die Elemente eine geringe chemische Affinität zueinander



haben (führt zu einer statistischen Verteilung der Atome) → geringere elektrische und thermische Leitfähigkeit sowie höhere Festigkeit und Härte (Mischkristallverfestigung)

Änderung der Gitterkonstante erfolgt linear mit Änderung der Konzentration der Fremdatome → Vegard'sche Regel:  $a_0^{MK} = a_0^A * c^A + a_0^B * c^B$  (a = Gitterkonstanten, c = Konzentrationen)

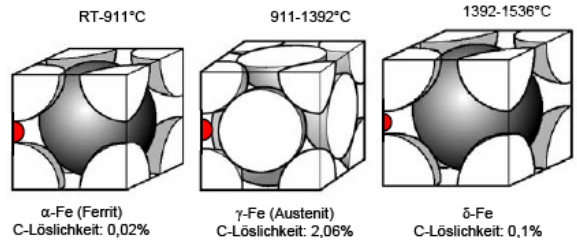
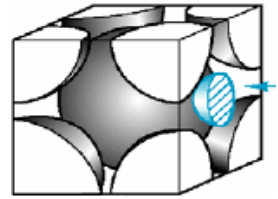
Analyse eines Mischkristalls kann röntgenographisch über Ermittlung seiner Gitterkonstante erfolgen



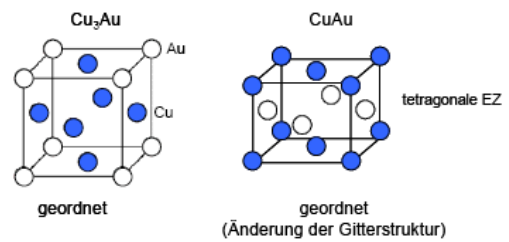
- Unterschied zwischen einem Mischkristall und einem Kristallgemisch (siehe auch Bild rechts)

Mischkristall	Kristallgemisch
Atomgitter besteht aus mind. 2 Atomsorten, Konzentration der Komponenten A und B in den einzelnen Kristallkörnern des Materials sowie der Gittertyp der Elementar sind stets gleich	Besteht aus unterschiedlichen Kristalliten bzw. Phasen, die sich in der Konzentration von A und B unterscheiden, z.B. α-Phase nur aus A, β-Phase nur aus B oder α-Phase aus viel A und ein wenig B, β-Phase aus viel B und wenig A, außerdem können Phasen unterschiedliche Gittertypen haben

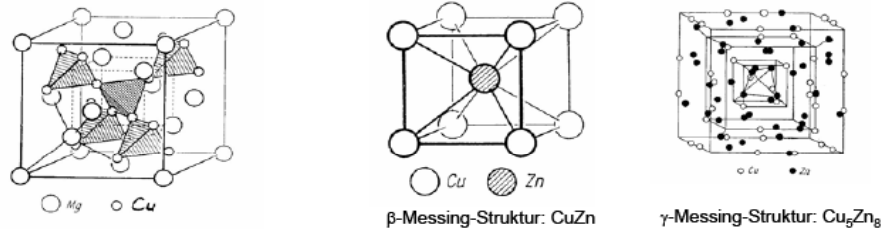
- Einlagerungsmischkristalle: Kleinere Nichtmetallatome (C, N) lagern sich in die Lücken eines Metallgitters ein, wichtig: Einbau von C in Eisen (Stahl, Gusseisen) (C besetzt Oktaederlücken eines krz Gitters) → geringe Löslichkeit im Wirtsgitter (metallische Eigenschaften ändern sich nicht), Löslichkeit sinkt mit abnehmender Temperatur (Lücken werden kleiner, da Atome bei Temperaturniedrigung weniger schwingen), bei schneller Abkühlung bleiben die interstitiell eingelagerten Atome oft zwangsgelöst (Entstehung von Gitterverzerrungen); z.B. Eisen: Umwandlung bei 911°C in kfz-Struktur mit größeren Lücken → größere C-Löslichkeit, bei 1392°C Zurückumwandlung in krz-Struktur → wieder geringere C-Löslichkeit, aber größere als bei Raumtemperatur, da jetzt größere Gitterkonstante



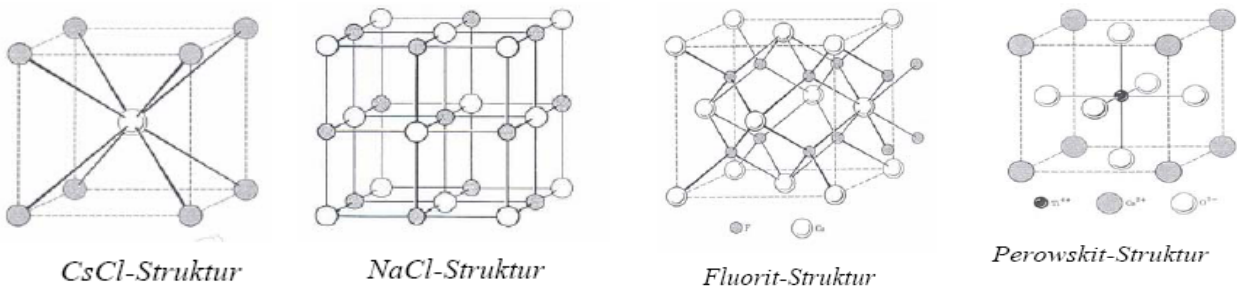
- Ordnungs- und Überstrukturen: Bei bestimmten Konzentrationen zwischen 2 Komponenten eines Substitutionsmischkristalls kann ein Übergang von einer statistischen Verteilung der Atome auf den Gitterplätzen zu einer geordneten Verteilung stattfinden (z.B. bei CuAu und Cu<sub>3</sub>Au). Überstrukturbildung verläuft stets unter Symmetrieverlust, entweder durch Bildung primitiver Untergitter oder andersartiger Übergitter; Ordnungsphasen sehr instabil, da sie nur bei sehr langsamer Abkühlung entstehen → können leicht durch thermische oder mechanische Beanspruchung zerstört werden



- Intermetallische Phasen: resultieren aus dem Einbau von Atomen eines zweiten Metalls in ein metallisches Wirtsgitter in der Form, dass diese eine neue Kristallstruktur bilden → wegen Durchdringung zweier Kristallstrukturen sind intermetallischen Phasen sehr spröde, hart und deutlich stabiler als Überstrukturen; z.B. Laves-Phasen (AB<sub>2</sub>, r<sub>A</sub>/r<sub>B</sub> = 1,225, KOZ = 13,3, keine plastische Verformung, aber hohe elektrische Leitfähigkeit): MgCu<sub>2</sub> (kubisch) mit Stapelfolge ABCABC oder Hume-Rotary-Phasen: β-Messingstruktur CuZn oder γ-Messingstruktur Cu<sub>5</sub>Zn<sub>8</sub>



- Ionenstrukturen: bestehen aus positiv geladenen Metall-Kationen und negativ geladenen Nichtmetall-Anionen, die sich gegenseitig durchdringende Teilstrukturen bilden

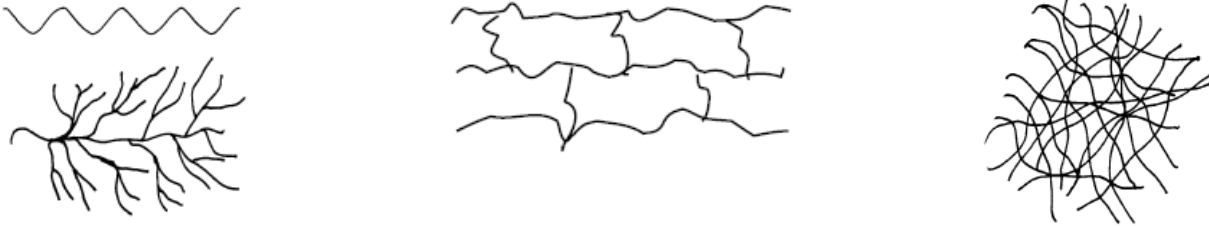


2 um 1/2 1/2 1/2 verschobene primitive Gitter	2 um 1/2 0 0 verschobene kfz-Gitter	Ca-Ionen bilden kfz-Gitter, alle Tetraederlücken mit F-Ionen besetzt (z.B. ZrO <sub>2</sub> )	Ca-Ionen bilden kub. prim. Gitter, O-Ionen auf Flächenmitten, Ti-Ion in Mitte
---	-------------------------------------	---	---

- Kovalente Strukturen: Zinkblenden (ZnS)-Struktur: S-Atome bilden kfz-Gitter, Zn-Ionen besetzen Hälfte der Tetraederlücken; ähnelt Diamantenstruktur, besteht aber aus 2 und nicht nur 1 Atomsorte; Diamant-Struktur (sp<sup>3</sup>): C-Atome besetzen gleiche Plätze wie Zn/S bei Zinkblenden, keine freie Elektronen, daher Isolator, da das 2s- und alle 3 2p-Atome auf einem Energieniveau sind (nach sp<sup>3</sup>-Hybridsierung) und alle für die Edelgaskonfiguration benötigt werden, d.h. eine Bindung eingehen; Graphit-Struktur (sp<sup>2</sup>): C-Atome besetzen gleiche Plätze wie Zn/S bei Zinkblenden, im Gegensatz zu Diamant aber nach sp<sup>2</sup>-Hybridisierung nur 3 Elektronen zum Binden; Bindung erfolgt innerhalb der Ebenen, am Rand ein freies π-Elektron → entlang der Ebenen, aber nicht senkrecht dazu(!) leitend

### 3.5 Molekülstrukturen (Strukturen von Hochpolymeren)

- Aufbauprinzip und Infrastruktur von Makromolekülen: Polymere entstehen durch eine Polymerisations-, Polyadditions- oder Polykondensationsreaktion aus ein oder mehreren Monomeren unter Aufspaltung von Doppelbindungen → innerhalb der Ketten kovalente Bindung, zwischen den Ketten nur van der Waals Kräfte
- Konstitution von Makromolekülen: Wichtig für die Verknüpfung sind: chemisches Aufbauprinzip (Typ und Anordnung der Atome), Arten der Substitution, Sequenz der Grundbausteine, Art und Länge der Verzweigung, relative Molekülmasse und Verteilungsfunktion; Hochpolymere aus asymmetrischen Struktureinheiten (SE), z.B. PVC können regelmäßig, alternierend, statistisch (regellos) aufgebaut sein; Hochpolymere aus mehreren SE können regelmäßig, statistisch oder in Block- oder Pfropf-Formen aufgebaut sein
- Thermoplaste, Elastomere und Duromere



Thermoplaste	Elastomere	Duromere
Lineare/verzweigte Hochpolymere	Schwach vernetzte Hochpolymere	Stark vernetzte Hochpolymere
i.d.R. leicht löslich und schmelzbar, aus der Schmelze verarbeitbar	Unlöslich und nicht schmelzbar, Vernetzung durch Verknüpfung der Ketten untereinander z.B. über Schwefelbrücken	Unlöslich und nicht schmelzbar, werden nicht aus der Schmelze hergestellt, sondern über Mischung der Ausgangskomponenten

- Konfiguration von Makromolekülen: liefert Informationen über stabile, geometrische Anordnung bestimmter Atome bzw. Atomgruppen zueinander oder längs der Atomkette, z.B. cis- und trans-Konfiguration bei Seitengruppen
- Konformation von Makrostrukturen: liefert Informationen zur räumlichen Anordnung bestimmter Atomgruppen in oder an den Molekülketten, die durch Einfachbindungen gebunden sind; Konformationsisomere entstehen durch Umklappen oder Drehen solcher Atomgruppen um die Bindungsachse der Einfachbindung
- Kristallstrukturen von Hochpolymeren: Kristallisation von Polymeren nur bei regelmäßiger Konstitution, Konfiguration und Konformation möglich; Keimbildung wird erschwert durch große Länge der Moleküle → nur Teilkristallisierung möglich, z.B. Polyethylen (40 bis 60 % Kristallisationsgrad in einer orthorhombischen EZ) oder Polyamid

## 4) Störung in kristallinen Festkörperstrukturen (Kristallbaufehler)

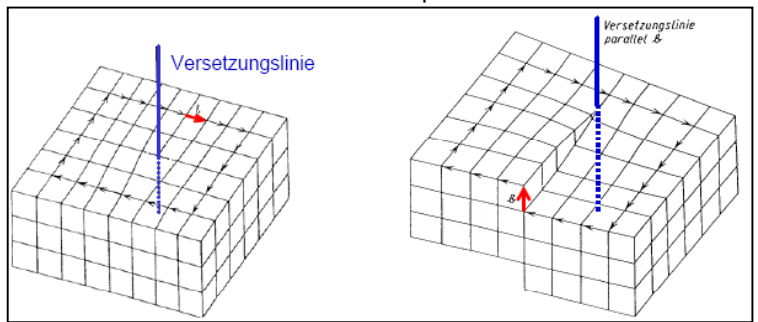
### 4.1 Punktdefekte (nulldimensionale Gitterstörungen)

- Punktdefekte sind Störungen, welche die Gitteratome selbst betreffen und deren Ausdehnung die atomare Größenordnung nicht überschreiten.
- Punktdefekt, wenn eine Leerstelle da ist, ein Atom von einem regulären Gitterplatz auf einen Zwischengitterplatz diffundiert und eine Leerstelle hinterlässt oder ein reguläres Atom durch ein Fremdatom substituiert wird
- Punktdefekte stehen im thermodynamischen GG (Konzentration temperaturabhängig): Je höher Temperatur, desto mehr Leerstellen (siehe rechts,  $N$  = Gesamtanzahl Atome,  $E_A$  = Aktivierungsenergie,  $T$  = Temperatur,  $R$  = universelle Gaskonstante)
 

$$n_L = N \cdot e^{\left(\frac{-E_A}{RT}\right)}$$
- In Ionenstrukturen verschiedene Defekte möglich, die alle mit Ladungsdefekten verbunden sind: *Schottky-/Anti-Schottky-Effekt*: Kation und Anion fehlen (Leerstelle) bzw. gehen auf Zwischengitterplatz; *Frenkel-/Anti-Frenkel-Effekt*: Kation bzw. Anion geht auf Zwischengitterplatz unter Bildung einer Leerstelle

### 4.2 Versetzungen (eindimensionale Gitterstörungen)

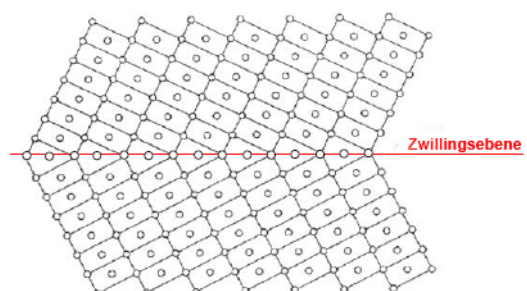
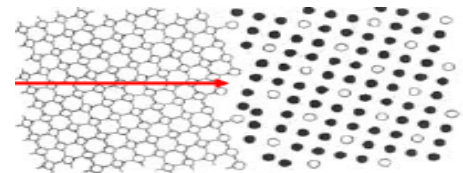
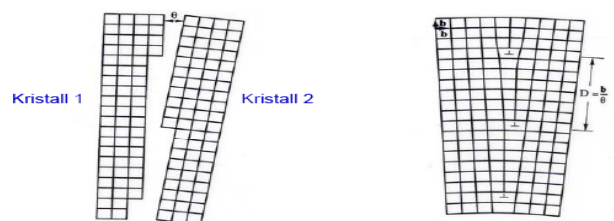
- Versetzungen entstehen infolge von Spannungen, entweder aufgrund mechanischer Verformung oder durch Spannungs- und Temperaturgradienten direkt beim Kristallisationsprozess und führen zu Gitterverzerrungen in der näheren Umgebung.



- 2 Gruppen: Stufenversetzungen und Schraubenversetzungen
- Ausmaß der Verzerrung kann über den Burgersvektor beschrieben werden → Umlauf durch gestörtes Gitter und dann in ungestörtes Gitter übertragen → Größe und Richtung der Wegdifferenz zwischen beiden Umläufen, die nötig ist, um den Umlauf im ungestörten Gitter zu schließen = Burgersvektor
- Stufenversetzung: Burgersvektor und Versetzungslinie stehen senkrecht zueinander (linkes Bild)
- Schraubenversetzung: Burgersvektor und Versetzungslinie sind parallel (rechtes Bild)
- Bewegen von Versetzungen geschieht entlang von Gleitebenen → sukzessives Auflösen und Wiederherstellen jeweils einer Bindung entlang der Gleitebenen bis zur Oberfläche (bevorzugte Gleitebenen sind die dicht gepacktesten Ebenen, kfz: {111}-Ebene, [110]-Gleitrichtung → Gleitsystem:  $\langle 110 \rangle \{111\}$ )

### 4.3 Zweidimensionale Kristallbaufehler

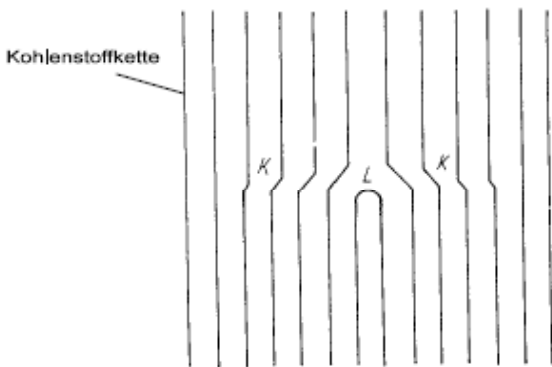
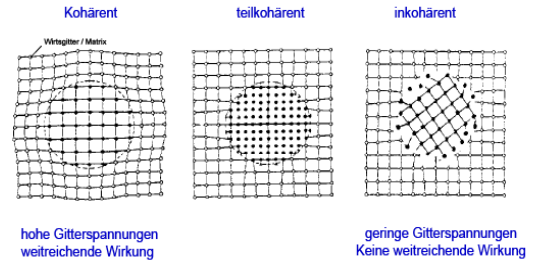
- Kleinwinkelkorngrenzen sind aus einer Serie von Stufenversetzungen aufgebaut, entstehen beim Zusammenstoß zweier nur in sehr geringem Maß zueinander verdrehter Kristalle. Die Energie ergibt sich aus den Einzelenergien der Versetzungen (Schema siehe rechts).
- Großwinkelkorngrenzen (Flächendefekte) sind große Schwachstellen des Kristallgitters, da nur sehr wenige Bindungen zwischen den Körnern und der Korngrenzphase bestehen (siehe rechts). Dadurch ergibt sich ein energetisch sehr ungünstiger Zustand.
- Zwillingkorngrenzen (Flächendefekte) sind Großkorngrenzen mit ungestörtem Gitteraufbau, d.h. sie besitzen eine hohe kristallographische Ordnung → energetisch sehr günstig; können wie eine Spiegelung eines Kristalls an einer Zwillingsebene beschrieben werden



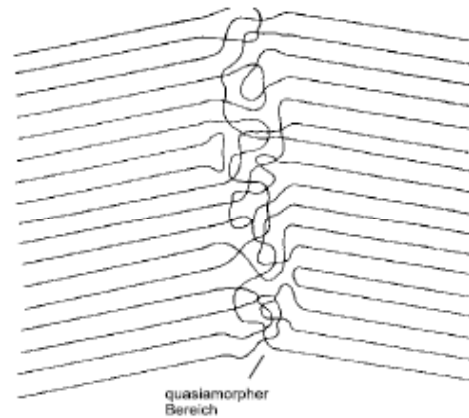
- Stapelfehler (Flächendefekte) sind Störungen in der Stapelfolge von Gitterebenen, z.B. ABABC statt ABCABC beim kfz-Gitter.
- Antiphasengrenzen (Flächendefekte) entstehen, wenn 2 geordnete Bereiche OXOX und XOXO aufeinandertreffen, wobei die Abfolge der Atome beider Bereiche umgekehrt ist, sodass an der Antiphasengrenze nicht mehr unterschiedliche, sondern gleiche Atome zusammenstoßen: OXOXXOXO.

#### 4.4 Dreidimensionale Gitterstörungen

- Phasengrenzflächen entstehen, wenn 2 unterschiedliche Phasen aneinandergrenzen. Sind sich die Phasen sehr ähnlich → viele Bindungen, Ausgleich der Unterschiede durch Verzerrung; sind sie sich kaum ähnlich → keine Bindungen, kaum Verspannung (siehe rechts)
- Störungen in Molekülstrukturen (Hochpolymeren) entstehen, wenn Ketten möglichst dicht gepackt werden sollen, aber Kinken (K) oder Leerstellen (L) stören. Kinken sind kleinere Auslenkungen der Molekülketten, Jogs sind größere. Leerstellen entstehen an Faltungen und Kettenenden. Zwischen den Kristalliten existieren amorphe Grenzschichten.



*Faltungen in einzelnen Kohlenstoffketten*



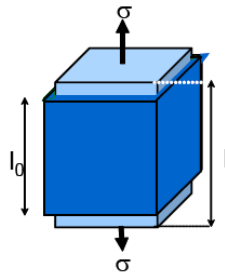
*Ungeordneter Bereich bei Orientierungsänderung*

## 5) Mechanisches Verhalten

### 5.1 Allgemeines

- Verhalten eines Werkstoffs unter mechanischer Beanspruchung (3 Stadien) ist beim Einsatz in der Praxis enorm wichtig → wichtigste Werkstoffeigenschaften: Festigkeit und Verformbarkeit
- Reversible Verformung: Belastung, Entlastung → Material nimmt ursprüngliche Form wieder an → linear-elastische Verformung
- Irreversible Verformung: Belastung, Entlastung → Verformung des Materials bleibt erhalten → plastische Verformung
- Bruch: Zerstörung (Trennung) des Materials durch das Ausbreiten von makroskopischen Rissen
- Wird ein Werkstoff mit einer äußeren Kraft  $F$  beansprucht, kann aus dieser Kraft eine Spannung (bei zur Fläche  $A$  senkrechter Beanspruchung: Normalspannung) errechnet werden:  $\sigma = F / A = E \cdot \varepsilon$

- Bei Längsdehnung
  - $\sigma$  = Zugspannung
  - $\varepsilon$  = Dehnung
  - $E$  = Elastizitätsmodul
  - $l$  = neue Länge
  - $l_0$  = alte Länge



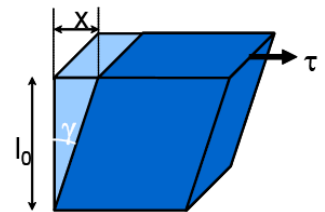
Normalspannung

Längenänderung:  $\Delta l = l - l_0$

Dehnung:  $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$

Querkontraktion:  $\varepsilon_q = -\nu \cdot \varepsilon_0$

- Bei Querschiebung
  - $\tau$  = Schubspannung
  - $\gamma$  = Schiebung
  - $G$  = Schubmodul
  - $x$  = maximale Auslenkung



Schubspannung

Schiebung:  $\gamma = \frac{x}{l_0}$

Schubspannung:  $\tau = G \cdot \gamma$

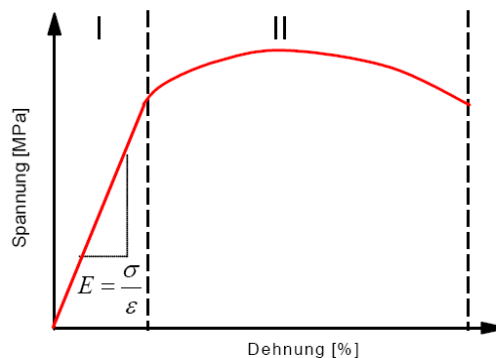
- Querkontraktionszahl  $\nu = E / 2G - 1$  (Poisson'sche Konstante)

- Bei vielen Werkstoffen besteht zwischen der Spannung und der elastischen Verformung ein linearer Zusammenhang, der als *Hook'sches Gesetz* bezeichnet wird.

- Einheiten siehe Anhang

### 5.2 Linear-elastische (= reversible) Verformung

- I: linear-elastisch, reversibel, es gilt das Hook'sche Gesetz zwischen Spannung und Dehnung
- Atome hier über „Federn“ verbunden; bei Ziehen Verformung, danach Entspannung und Rückkehr in den Anfangszustand; Stärke der Federkraft ist vom E-Modul abhängig → je höher E-Modul, desto mehr Kraft wird benötigt, um Atome aus ihrer Ausgangsposition herauszubekommen → größere Steifigkeit des Materials



Bereich I: linear elastischer

Bereich mit  $E = \frac{\sigma}{\varepsilon}$

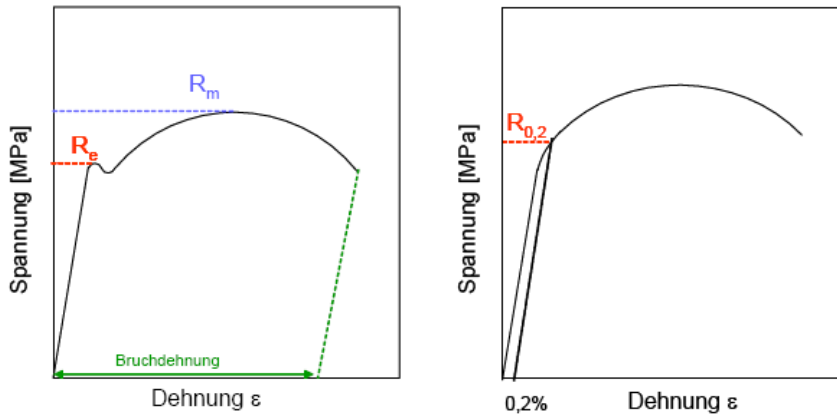
Bereich II: plastische (irreversible) Verformung

- Elastische Konstanten von Natur aus richtungsabhängig (anisotrop) → Ausmaß der Verformungen in den einzelnen kristallographischen Richtungen unterschiedlich, aber in der Regel vernachlässigbar, da Metalle und Keramiken aus sehr vielen, statistisch orientierten Kristallen bestehen → Material verhält sich makroskopisch gesehen isotrop

### 5.3 Plastische (= irreversible) Verformung

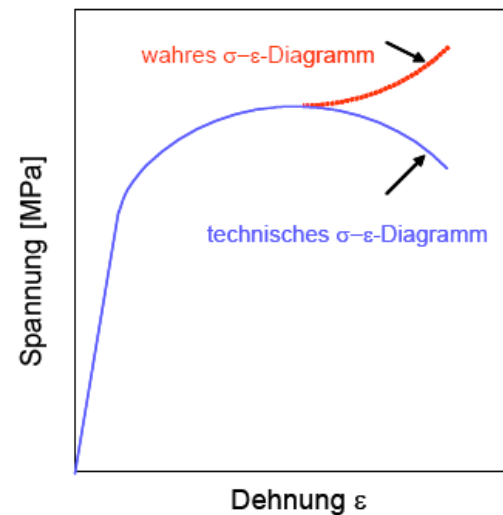
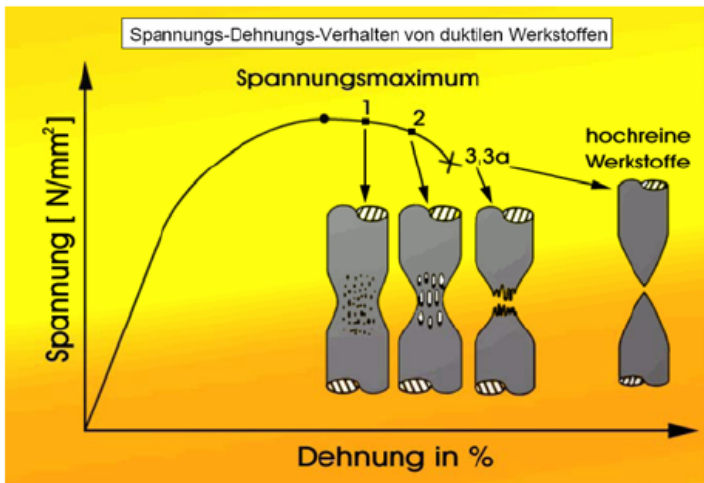
- II: plastischer Bereich schließt sich dem linear-elastischen Bereich an, hier nicht reversibel
- Streckgrenze = Ende des elastischen Bereiches, bei Metallen als  $R_e$  bezeichnet; Übergang zwischen elastischem und plastischem Bereich ist bei einigen Werkstoffen kontinuierlich, bei anderen tritt ein Unstetigkeitsbereich auf, der durch kleine Spannungsabfälle der Spannungs-Dehnungs-Kurve gekennzeichnet ist; bei Kontinuität Einführung von  $R_{0,2}$  (Spannung bei Dehnung 0,002 = 0,2 %) als Ersatzstreckgrenze
- Zugfestigkeit = Spannungsmaximum der Spannungs-Dehnungs-Kurve, bei Metallen als  $R_m$  bezeichnet
- Bruchdehnung  $\varepsilon_{\text{Bruch}}$  = plastischer Anteil der Dehnung zum Zeitpunkt des Bruches

- Diagramme zur Verdeutlichung



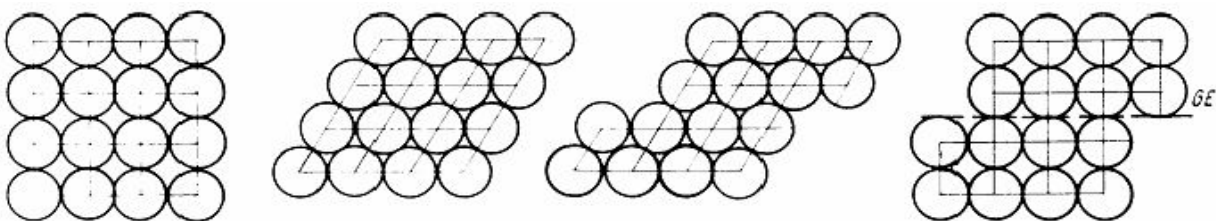
Spannungs-Dehnungsdiagramm eines Werkstoffs mit a) Streckgrenze  $R_e$ , Zugfestigkeit  $R_m$  und Bruchdehnung b) mit Ersatzstreckgrenze  $R_{0,2}$

- Nach Erreichen des Spannungsmaximums fällt Spannung bis zur Bruchspannung (hier versagt die Makrorissausbreitung) ab → technisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm: Spannung = Quotient aus Kraft durch Ausgangsquerschnittsfläche  $A_0$ , tatsächlich aber bei weiterer Verformung über die maximale Spannung hinaus Verjüngung des Querschnitts in der Mitte der Probe = Einschnürung



Technisches  $\sigma$ - $\epsilon$ -Diagramm:  $\sigma = \frac{F}{A_0}$ , wahres  $\sigma$ - $\epsilon$ -Diagramm:  $\sigma = \frac{F}{A_{\text{aktuell}}}$

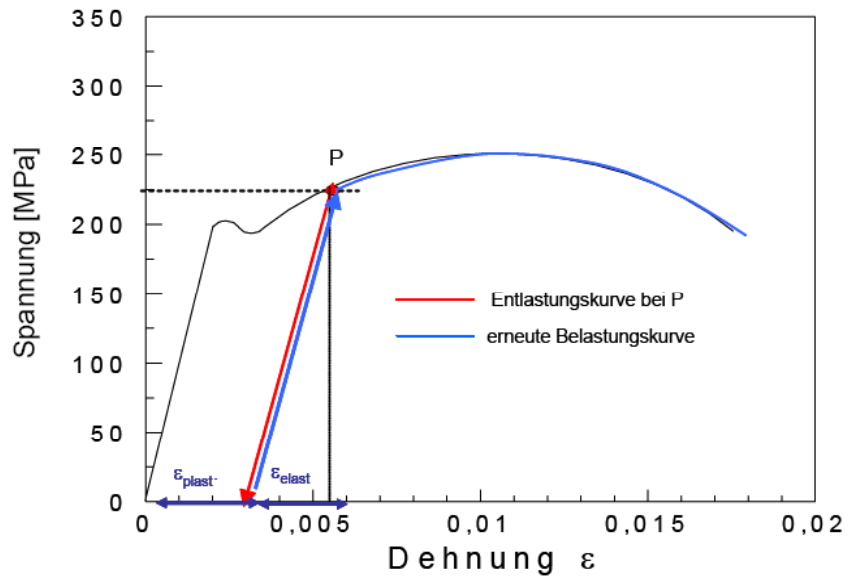
- Schaubilder zur Verschiebung von Atomreihen (elastisch und plastisch)



unbelastet      elastisch      elastisch+plastisch      plastisch

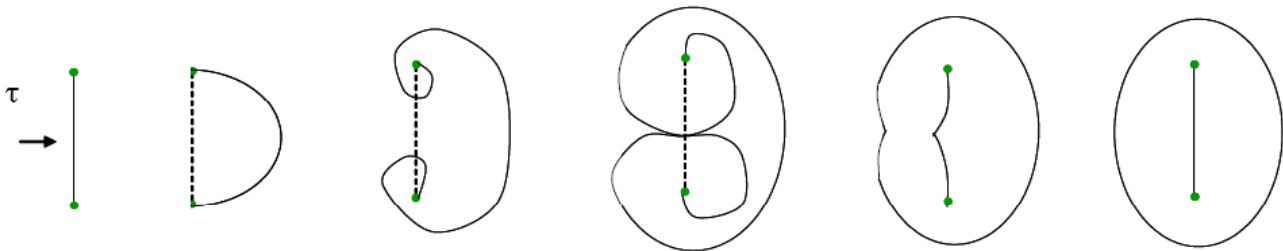
- Anzahl der Versetzungen (Versetzungsdichte) nimmt mit steigendem Verformungsgrad kontinuierlich zu → auch Streckgrenze steigt = Kaltverfestigung, d.h. entlastet man einen bis zu einem bestimmten Verformungsgrad plastisch verformtes Material wieder, besitzt es eine höhere Versetzungsdichte und somit eine höhere Streckgrenze als im unbelasteten Zustand, es ist also kaltverfestigt; auch der Anteil der elastischen Verformung steigert sich, wenn die Probe einmal in den plastischen Bereich hinein belastet und anschließend wieder entlastet wurde

- Entlastungskurve ist streng linear und läuft parallel zur Hook'schen Gerade bis zur vollständigen Entlastung auf  $\sigma = 0$  zurück
- Probe ist nach der Entlastung um den plastischen Dehnungsanteil  $\epsilon_{\text{plast}}$  verlängert und weist eine höhere Versetzungsdichte auf
- Elastischer Dehnungsanteil  $\epsilon_{\text{elast}}$  ist vollständig reversibel
- Kurve bei erneuter Belastung = Entlastungskurve, plastische Verformung erst bei P  $\rightarrow$  linear-elastischer Bereich und Streckgrenze haben sich aufgrund der höheren Versetzungsdichte vergrößert



#### 5.4 Bildung und Wechselwirkung von Versetzungen

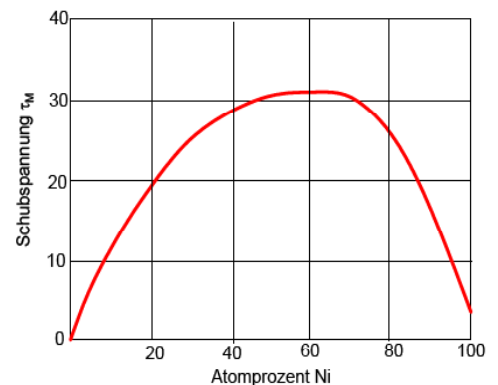
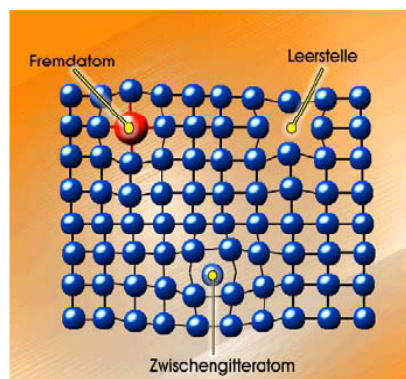
- Plastische Verformung beruht auf Bewegung von Versetzungen  $\rightarrow$  bei plastischer Verformung steigt die Versetzungsdichte des Materials
- Frank-Reed-Quelle = Modell, wie durch plastische Verformung Versetzungsmultiplikation erfolgt:



- Auf Versetzungslinie zwischen 2 Punkten wirkt Schubspannung  $\rightarrow$  Versetzungslinie beult sich aus  $\rightarrow$  wird instabil  $\rightarrow$  Versetzungsring löst sich und Versetzungslinie kehrt in ihre alte Lage zurück
- Je mehr Ringe entstehen, desto mehr Energie bzw. umso größere Schubspannungen werden benötigt, um Ringe abzuspalten  $\rightarrow$  Die gegenseitige Behinderung der Versetzungsbewegung ist die Ursache für die als Verformungs- oder Kaltverfestigung bezeichnete Zunahme der erforderlichen Schubspannung im Verlauf der plastischen Verformung.

#### 5.5 Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Fremdatomen

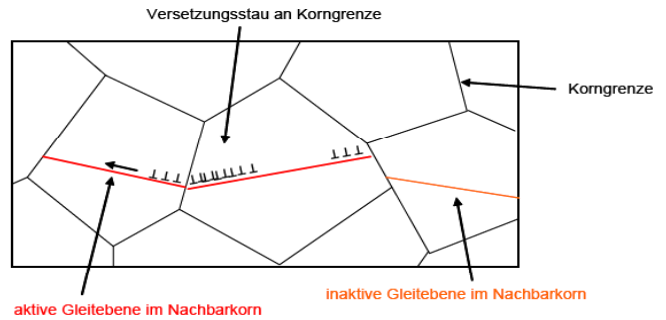
- Mischkristallverfestigung: Bei Einbau von Fremd- oder Legierungsatomen kommt es in der näheren Umgebung dieser Atome zu symmetrischen Gitterverzerrungen  $\rightarrow$  Normalspannungsfeld. Trifft nun eine Stufenversetzung, deren Gitter in der näheren Umgebung ebenfalls verzerrt und von einem Spannungsfeld umgeben ist, auf das verzerrte Umfeld eines Fremdatoms, muss ein zusätzlicher Spannungsbetrag aufgebracht werden, um die Versetzung durch das Fremdatom hindurchzubewegen  $\rightarrow$  Mischkristallverfestigung. Diese steigt mit zunehmender Konzentration an substituierten Atomen (siehe Diagramm oben rechts: größte Spannung bei ca. 50 % Cu und 50 % Ni)



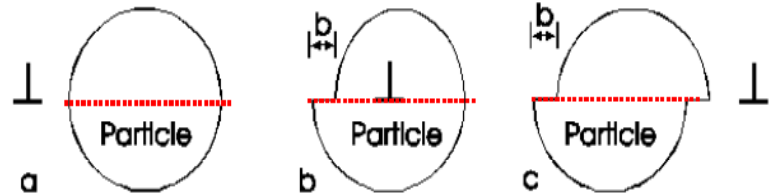
- Korngrenzenverfestigung: Treffen Versetzungen, die sich durch ein Korn bewegen, auf eine Korngrenze, bilden diese Korngrenzen Hindernisse für die Versetzungen, welche aufgestaut werden, sodass es zur Überlagerung der Normalspannungsfelder kommt. Die Versetzungen werden erst dann in das benachbarte Korn übergeben, wenn eine bestimmte, vom Korndurchmesser begrenzte,



Aufstaulänge erreicht wird → es werden im Nachbarkorn Gleitebenen mit ähnlichen Gleitrichtungen aktiviert. Durch Behinderung der Versetzungsbewegung steigt Streckgrenze des Materials → je feinkörniger Material und je mehr Korngrenzen, desto größer als Streckgrenze → Korngrenzenverfestigung.



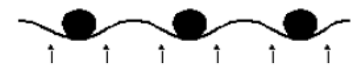
- Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Teilchen: *Schneidmechanismus*: Trifft eine Versetzung auf eine Ausscheidung im Innern des Kornes, so kann sie das Teilchen entweder schneiden oder es umgehen. Sind Teilchen und Matrix (Grundwerkstoff) kohärent (ähnlich), dann gehen die Gleitsysteme des Teilchens in die Matrix über und die Versetzung kann auf der gleichen Gleitebene durchlaufen



a) Versetzungslinie trifft auf Teilchen



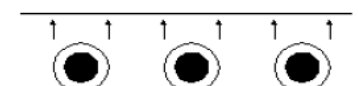
b) unterkritisches Ausbauchen der Versetzungslinie



c) kritisches Ausbauchen → instabiler Zustand

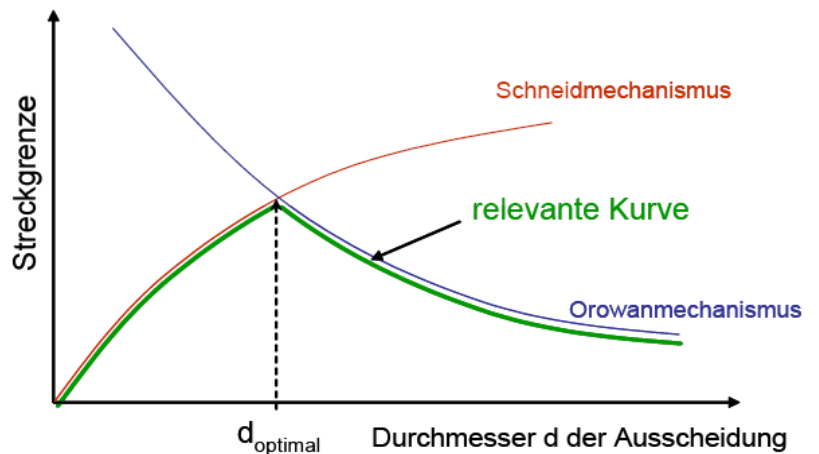


d) Versetzungslinie läuft weiter



Bildung von Versetzungsringen

*Einfluss des Partikeldurchmessers auf die Streckgrenze*: Teilchen und Matrix teilkohärent → Teilchen werden geschnitten oder umgangen. Stimmen Burgersvektor und Gleitebene von Matrix und Ausscheidung überein, wird geschnitten, ansonsten umgangen → trägt man Streckgrenze über Partikeldurchmesser für Schneid- und Orowanmechanismus auf, ergibt sich eine optimale Ausscheidungsgröße  $d$ , bei der Verfestigungseffekt und Anstieg der Streckgrenze am Größten ist ( $d_{\text{optimal}}$ )

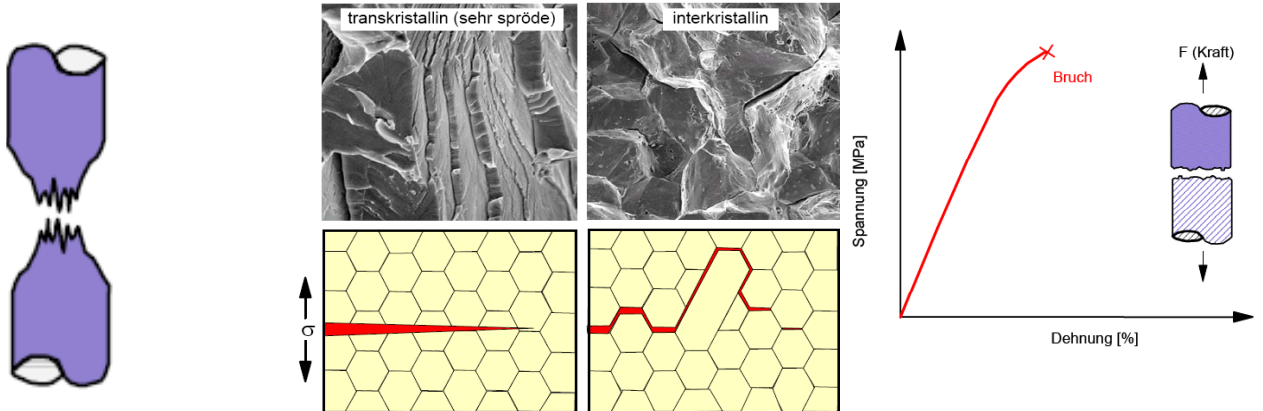


→ Festigkeit bzw. Streckgrenze eines Materials kann erhöht werden durch:

Mischkristallverfestigung, Kalt- bzw. Verformungsverfestigung, Dispersionsverfestigung (Einlagerung feindispers verteilter Teilchen im Korninneren) und Korngrenzenverfestigung (Feinkörnverfestigung), d.h. Reduzierung der Korngröße

## 5.6 Bruch

- Wird Bruchspannung erreicht, kommt es zum Versagen des Bauteils → Bruch = makroskopische Trennung eines Bauteils in zwei oder mehrere Bruchstücke durch Aufspalten der Bindungen im Material (typisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei spröder Keramik siehe ganz rechts)

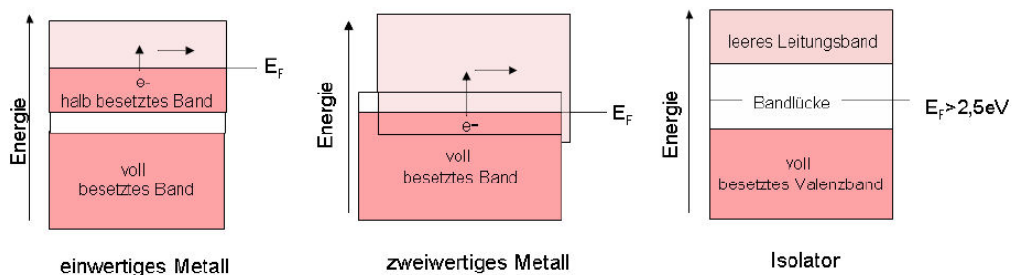
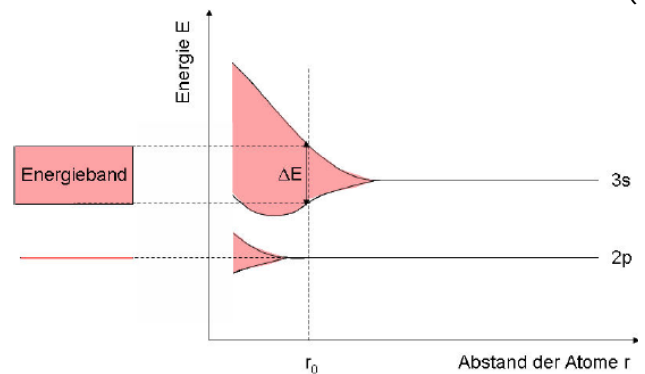


Zähbruch (siehe links)	Sprödbbruch - transkristallin (Mitte links)	Interkristallin (Mitte rechts)
wird von einer starken Verformung und Einschnürung des Werkstoffes vor dem Bruch begleitet.	Riss läuft gerade, d.h. nahezu auf einer Ebene und ohne Rissumlenkung und mitten durch die Körner hindurch	Riss läuft entlang der Korngrenzen und nicht durch die Körner hindurch, Weg des Risses länger, weniger spröde

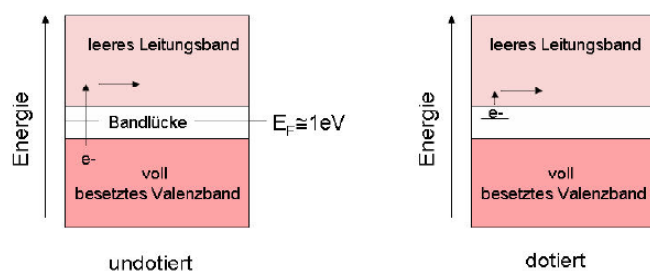
## 6) Physikalische Eigenschaften

### 6.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Beruhrt auf der gerichteten Bewegung elektrischer Ladungen, Ladungsträger können Elektronen oder Ionen sein
- Elektrische Leitfähigkeit  $\sigma = n \cdot q \cdot \mu$  ( $n$  = Anzahl der Ladungsträger,  $q$  = Ladung des Ladungsträgers,  $\mu$  = Mobilität der Ladungsträger)
- Spezifischer Widerstand  $\rho = 1 / \sigma = A \cdot R / l$  ( $A$  = Querschnittsfläche,  $R$  = ohmscher Widerstand,  $l$  = Länge des Leiters)
- Elektronische Leitung = Ladungstransport über Elektronen = Hauptmechanismus der elektrischen Leitfähigkeit metallischer Werkstoffe → Energiezustände der Elektronen müssen betrachtet werden (4 Quantenzahlen, die nicht alle übereinstimmen dürfen → jedes Elektron hat eigenes Energieniveau)
- Durch Wechselwirkung der Elektronen auch mit benachbarten Atomen werden die diskreten Niveaus aufgehoben und zu Energiebändern mit einer bestimmten Bandbreite  $\Delta E$  aufgespalten (siehe rechts)
- Bändermodell für einwertige Metalle (Na, K): nur ein Valenzelektron, d.h. das letzte mit Elektronen besetzte Band ist nur halb gefüllt und die Hälfte der möglichen Energiestufen frei → durch Zufuhr von Aktivierungsenergie können Elektronen des halb besetzten Bandes einen höheren Energiezustand erreichen und sich durch das Material bewegen → Grund für gute elektronische Leitfähigkeit dieser Metalle
- Bändermodell für zweiwertige Metalle (Mg): Letztes Energieband voll besetzt, allerdings überlappen sich das letzte voll besetzte Band mit dem darüber liegenden leeren Band, sodass bei Energiezufuhr die Elektronen leicht in das leere Band gehoben werden → gute Leitfähigkeit
- Bändermodell für Halbleiter (Si): ein voll besetztes Valenzband und ein leeres Leitungsband → Bandlücke, nicht größer als 1 eV, kann durch Energiezufuhr überwunden werden → Elektronen kommen vom Valenz- ins Leitungsband; Verbesserung durch Dotierung → Erschaffung zusätzlicher Energieniveaus, die kurz unterhalb des Leitungsbandes liegen → wenig Aktivierungsenergie nötig, um Elektronen ins Leitungsband zu heben → verbesserte Leitfähigkeit
- Bändermodell für Isolatoren (Diamant): ein voll besetztes Valenzband und ein leeres Leitungsband → Bandlücke, ca. 2,5 bis 3 eV, für Elektronen auch durch Energiezufuhr nahezu unüberwindbar

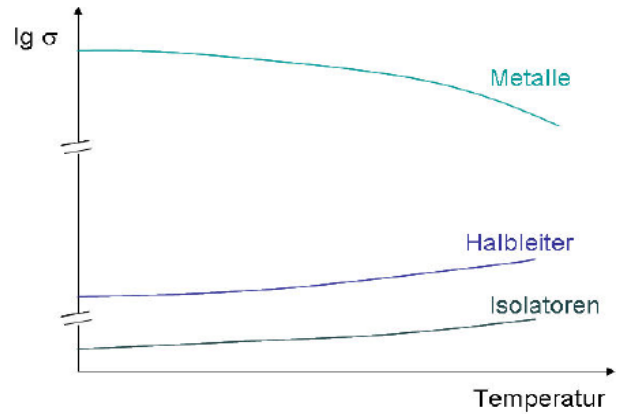


Bändermodell für einwertige Metalle, zweiwertige Metalle und Isolatoren



Bändermodell für einen undotierten und einen dotierten Halbleiter

- Leitfähigkeitsabhängigkeit von der Temperatur: bei Metallen sinkt  $\sigma$ , wenn T steigt, da Atome stärker schwingen  $\rightarrow$  Mobilität der Elektronen wird kleiner – bei Halbleitern steigt  $\sigma$ , wenn T steigt, da gilt: je höher die thermische Aktivierung, desto größer die Anzahl der Elektronen, die ins Leitungsband kommen und desto größer die Leitfähigkeit – bei Isolatoren steigt  $\sigma$ , wenn T steigt, da mehr Leerstellen (anstatt Ionen) entstehen und somit mehr Ionen durch das Gitter diffundieren können

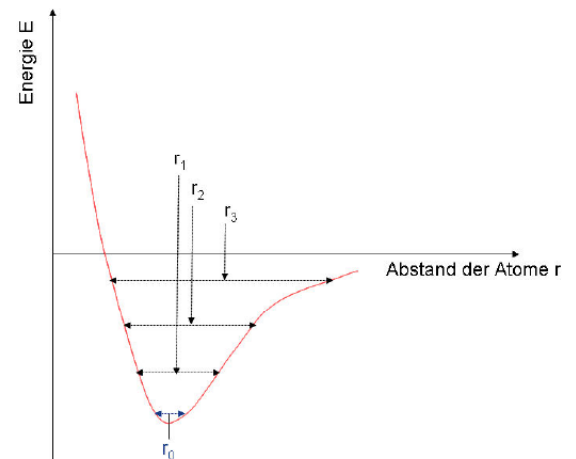


## 6.2 Wärmeleitfähigkeit

- Wärmeleitung = Transport thermischer Energie im Festkörper; i.d.R. folgt aus hoher elektrischer Leitfähigkeit hohe thermische Leitfähigkeit
- Großer Beitrag zur Wärmeleitung von Elektronen, die Energie aufnehmen und transportieren
- Wärmeleitfähigkeit  $\lambda = L * T * \sigma$  ( $L =$  Konstante,  $T =$  Temperatur,  $\sigma =$  elektrische Leitfähigkeit) (Wiedmann-Franz-Gesetz)
- Wärme wird auch über Schwingungen der Atome im Festkörper übertragen; diese Gitterschwingungen = Phononen  $\rightarrow \lambda_{ges} = \lambda_e + \lambda_G$  ( $\lambda_e =$  Elektronenwärmeleitfähigkeit,  $\lambda_G =$  Phononenwärmeleitfähigkeit)
- Vorraussetzungen für Phononenschwingungen: dichtes Gitter, starke Bindung, möglichst gleiche Atommassen  $\rightarrow$  Diamant ist bester Wärmeleiter

## 6.3 Thermische Ausdehnung

- Ist auf die Wärmeschwingungen der Atome zurückzuführen
- Thermische Ausdehnung definiert über Ausdehnungskoeffizient  $\alpha = \Delta l / (l_0 * \Delta T)$
- Befindet sich Atom in Mulde (GG), wirken keine Kräfte.
- Bei Erhöhung von T wird Material Energie zugeführt, Atome beginnen zu schwingen; wegen Asymmetrie der Parabel verschiebt sich Gleichgewichtsabstand  $r$  der Atome und wird größer  $\rightarrow$  Ausdehnung
- Thermische Ausdehnung umso kleiner, je stärker die Bindung: am Stärksten bei Polymeren, dann Metalle, am Schwächsten bei Keramiken
- Eigenschaftenrelationen:  $\alpha$  klein  $\rightarrow$  starke Bindungskräfte  $\rightarrow$  hoher Schmelzpunkt, hoher E-Modul;  $\alpha$  groß  $\rightarrow$  schwache Bindungskräfte  $\rightarrow$  niedriger Schmelzpunkt, niedriger E-Modul



## 7) Übergänge in den festen Zustand

### 7.1 Thermodynamische Grundlagen

- Gesamtenergie eines Systems = innere Energie  $U = f(T, V)$

- Änderung von U:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV$$

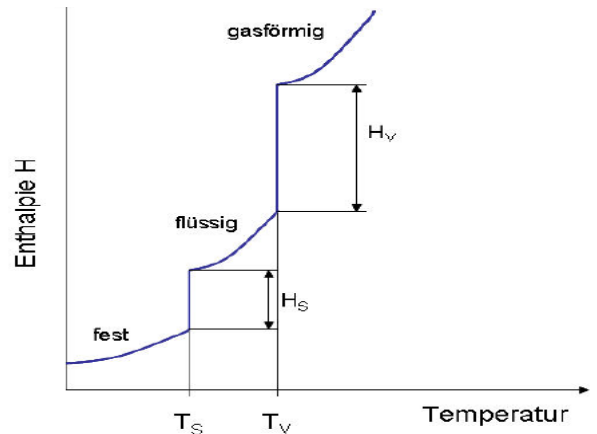
- Führt man einem homogenen System bei konstantem Volumen thermische Energie in Form einer Wärmemenge  $dQ$  zu, so erhöht sich die Temperatur des Systems. Es gilt:  $\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{dQ}{dT}\right)_V$
- Beschreibung Änderung der Energie eines Systems bei konstantem Druck: Enthalpie  $H = U + pV$

- Für die Änderung der Enthalpie gilt:  $dH = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p dT$  mit  $\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p dT = c_p$

- $c_p$  = Molwärme eines Stoffes

- Da sich Volumen bei Festkörpern kaum ändern, gilt:  $\Delta U = \Delta H$  (ungefähr)

- Grafik rechts zeigt Änderung der Enthalpie eines kristallinen Stoffes in Abhängigkeit von der Temperatur: keine Phasenumwandlung → Enthalpie des Systems steigt mit steigender Temperatur; bei Schmelztemperatur  $T_S$  und Verdampfungstemperatur  $T_V$  erhöht sich Enthalpie schlagartig um Schmelzenthalpie  $H_S$  bzw. Verdampfungsenthalpie  $H_V$ , Temperatur ändert sich nicht; allgemein ist  $H_V$  sehr viel größer als  $H_S$



- Definition freie Enthalpie  $G = H - TS$  ( $T$  = Temperatur,  $S$  = Entropie): Zustandsänderungen im Festkörper laufen mit dem Ziel ab, die freie Enthalpie  $G$  bei konstantem Druck zu minimieren, um so in den energieärmsten, stabilen Zustand zu gelangen, alle anderen Zustände metastabil

- $\Delta G = 0$ : Das System befindet sich in dem von Natur angestrebten thermodynamischen GG.

- $\Delta G < 0$ : Energie wird freigesetzt, d.h. ein freiwilliger Prozess läuft ab.

- $\Delta G > 0$ : Der Vorgang läuft nicht freiwillig ab.

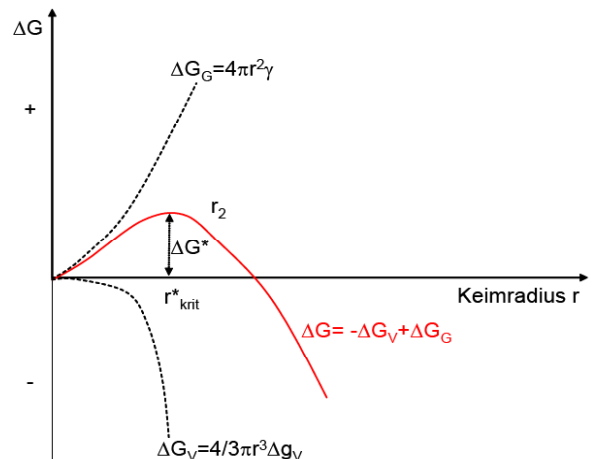
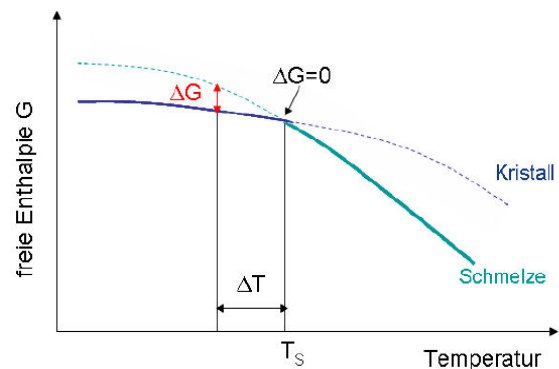
### 7.2 Übergänge vom flüssigen in den festen Zustand

- Kristallisation eines Stoffes erfolgt in 2 Schritten: Keimbildung und Keimwachstum

- Bei Kristallisationstemperatur  $T_S$  befinden sich Schmelze und Kristall im thermodynamischen GG, d.h. sie sind nebeneinander stabil und ihre Enthalpien sind gleich groß. Erst wenn eine gewisse Unterkühlung  $\Delta T$  vorhanden ist, können sich Keime bilden

- Zur Bildung einer kritischen Keimgröße  $r^*$  muss eine gewisse Keimbildungsenergie aufgebracht werden,

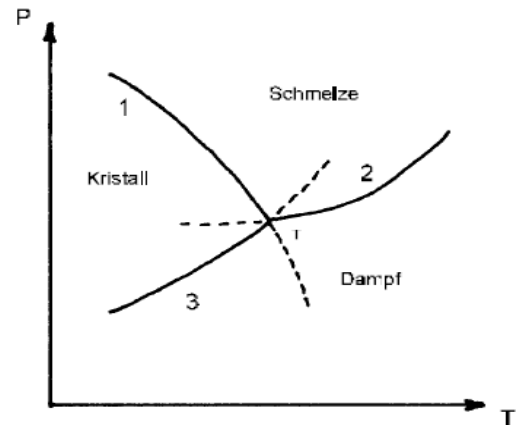
die mit  $\Delta G^*$  bezeichnet wird. Diese Keimbildungsenergie wird aus der Unterkühlung  $\Delta T$  bereitgestellt. Keime mit  $r < r^*$  zerfallen wieder, weil ihr Wachstum mit einer Zunahme der freien Enthalpie verbunden wäre. Keime mit  $r > r^*$  sind stabil wachsen, wobei mit steigendem Radius die freie Enthalpie des Systems immer kleiner wird (rechts: freie Bildungsenthalpie  $\Delta G$  in Abhängigkeit vom Keimradius  $r$ )



## 8) Zustandsdiagramme

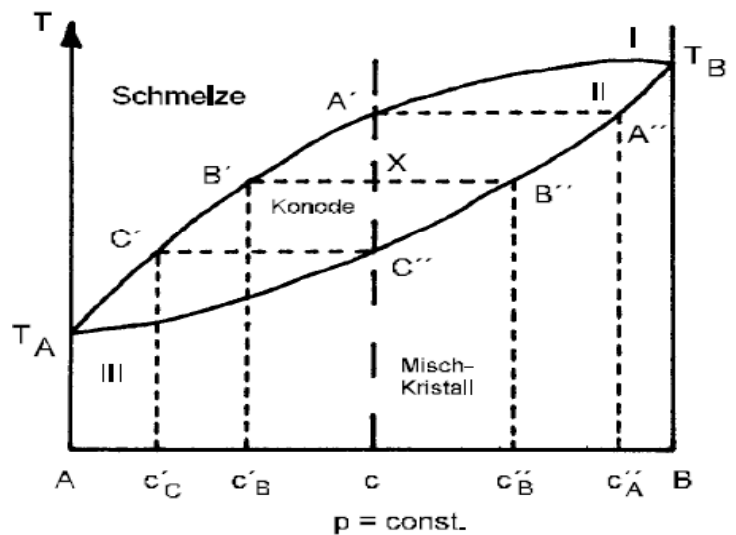
### 8.1 Allgemeines

- Zustandsdiagramme machen Aussagen über den stabilen Zustand eines Systems in Abhängigkeit von den Zustandsvariablen  $p$  und  $T$ .
- Beispiel Einkomponentensystem  $H_2O$  (siehe rechts):
- Gibbsche Phasenregel: Zusammenhang zwischen der Zahl der Komponenten  $K$ , der Zahl der Phasen  $P$  und der Zahl der Freiheitsgrade  $F$  (die unabhängig voneinander verändert werden können ohne dass sich die Zahl der Phasen ändert) eines heterogenen Systems:  $F = K + 2 - P$
- Tripelpunkt  $T$  ( $F = 0$ ): Gleichgewicht aller 3 Phasen
- 1 = Schmelzkurve
- 2 = Verdampfungskurve
- 3 = Sublimationskurve
- $F = 0$ : nonvariantes GG (auch: Nonvarianz),  $F = 1$ : univariantes GG,  $F = 2$ : bivariantes GG

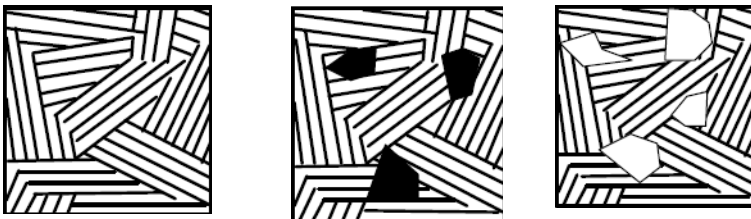


### 8.2 Grundtypen der Zustandsdiagramme von Zweistoffsystemen

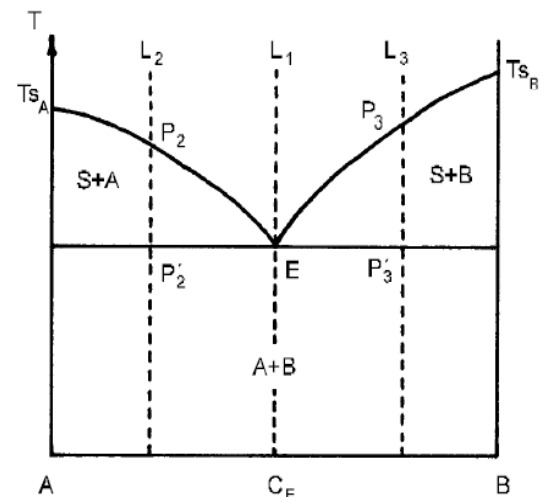
- Vollständige Mischbarkeit im festen und flüssigen Zustand ( $F = 1$ , da  $p = \text{const.}$ ):  
 I: homogene Schmelze, II: Zweiphasengebiet Schmelze / Mischkristall, III: Mischkristalle (MK);  $T_{A,B}$ : Schmelzpunkte der beiden Komponenten A und B; bei  $c$  kann man Konzentration von A (= 1 links) und B (= 1 rechts) ablesen; bei  $c'_B$  und  $c''_B$  kann man die Konzentration von A und B in der Schmelze bzw. im Mischkristall ablesen (Konode zeichnen und an den jeweiligen Phasengrenzen ablesen), weitere Berechnungen siehe Hebelregel und späteres Beispiel



- Hebelregel:  
 $(c_B^{\text{Kristall}} - c) / (c_B^{\text{Kristall}} - c_B^{\text{Schmelze}}) = \text{Menge an Schmelze}$   
 Menge der anderen Phase:  $1 - \text{Menge an Schmelze}$
- Vollständige Mischbarkeit im flüssigen und vollständige Unmischbarkeit im festen Zustand (Eutektikum):  $E = \text{Eutektikum}$ , Eutektische Reaktion:  $S \Leftrightarrow A + B$  ( $F = 0$ ), bei  $P_2$  und  $P_3$  primäre Ausscheidung der Komponenten A bzw. B aus der Schmelze



L1	L2	L3
E: Nonvarianz ( $p, T, c = \text{const.}$ ), Kristallisation setzt ohne Primärausscheidung von A und B ein (lamellar)	P2: Ausscheidung von A aus der Schmelze P2': Kristallisation von MK (lamellar angeordnet)	P3: Ausscheidung von B aus der Schmelze P3': Kristallisation von MK (lamellar angeordnet)



- Vollständige Mischbarkeit im flüssigen und teilweise Mischbarkeit im festen Zustand (Eutektikum E):

$\alpha$ ,  $\beta$ : Mischkristalle aus A und B

Reaktion am Eutektikum:  $S \Leftrightarrow \alpha + \beta$

Gefüge beim Abkühlen: lamellar

*Beispielrechnung für  $c_x$  und  $T_x$ :*

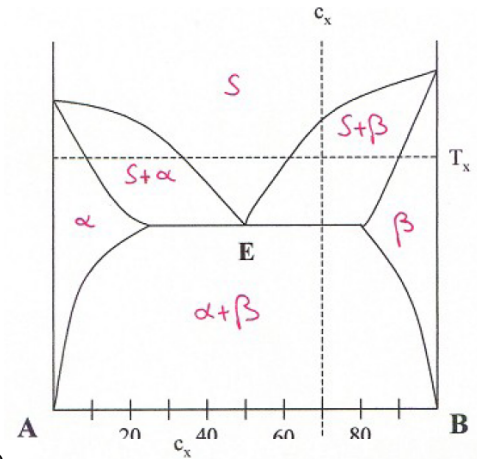
Gibbsche Phasenregel bei E:  $F = K - P + 1 = 2 - 3 + 1 = 0$ , da Komponenten A und B; Phasen  $\alpha$ ,  $\beta$ , S

$$m_{\text{Schmelze}} = (90 - 70) / (90 - 60) = 2/3$$

$$\rightarrow m_{\beta} = 1 - 2/3 = 1/3$$

$c_{\beta} = 90\% \text{ B und } 10\% \text{ A}$

$c_S = 60\% \text{ B und } 40\% \text{ A}$



- Vollständige Mischbarkeit im flüssigen und teilweise Mischbarkeit im festen Zustand (Inkongruentes Schmelzen – Peritektikum P):

$\alpha$ ,  $\beta$ : Mischkristalle aus A und B

Reaktion am Peritektikum:  $\alpha + S \Leftrightarrow \beta$

*Beispielrechnung für  $c_x$  und  $T_x$ :*

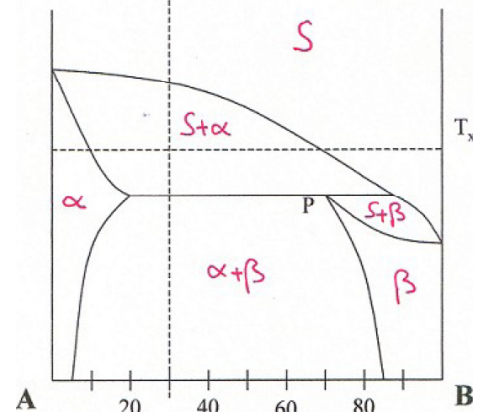
Gibbsche Phasenregel bei P:  $F = K - P + 1 = 2 - 3 + 1 = 0$ , da Komponenten A und B; Phasen  $\alpha$ ,  $\beta$ , S

$$m_{\text{Schmelze}} = (30 - 10) / (70 - 10) = 1/3$$

$$\rightarrow m_{\beta} = 1 - 1/3 = 2/3$$

$c_{\alpha} = 10\% \text{ B und } 90\% \text{ A}$

$c_S = 70\% \text{ B und } 30\% \text{ A}$



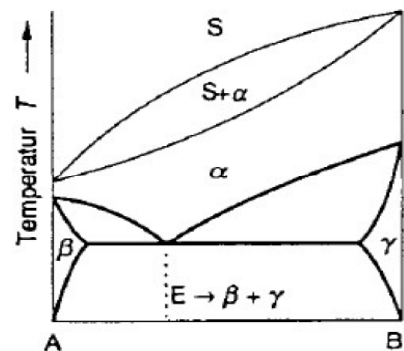
Phasen im Punkt P:  $\alpha = 20\% \text{ B}$ ,  $\beta = 75\% \text{ B}$ ,  $S = 85\% \text{ B}$

- Umwandlungen im festen Zustand (Eutektoid E):

$\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ : Mischkristalle aus A und B

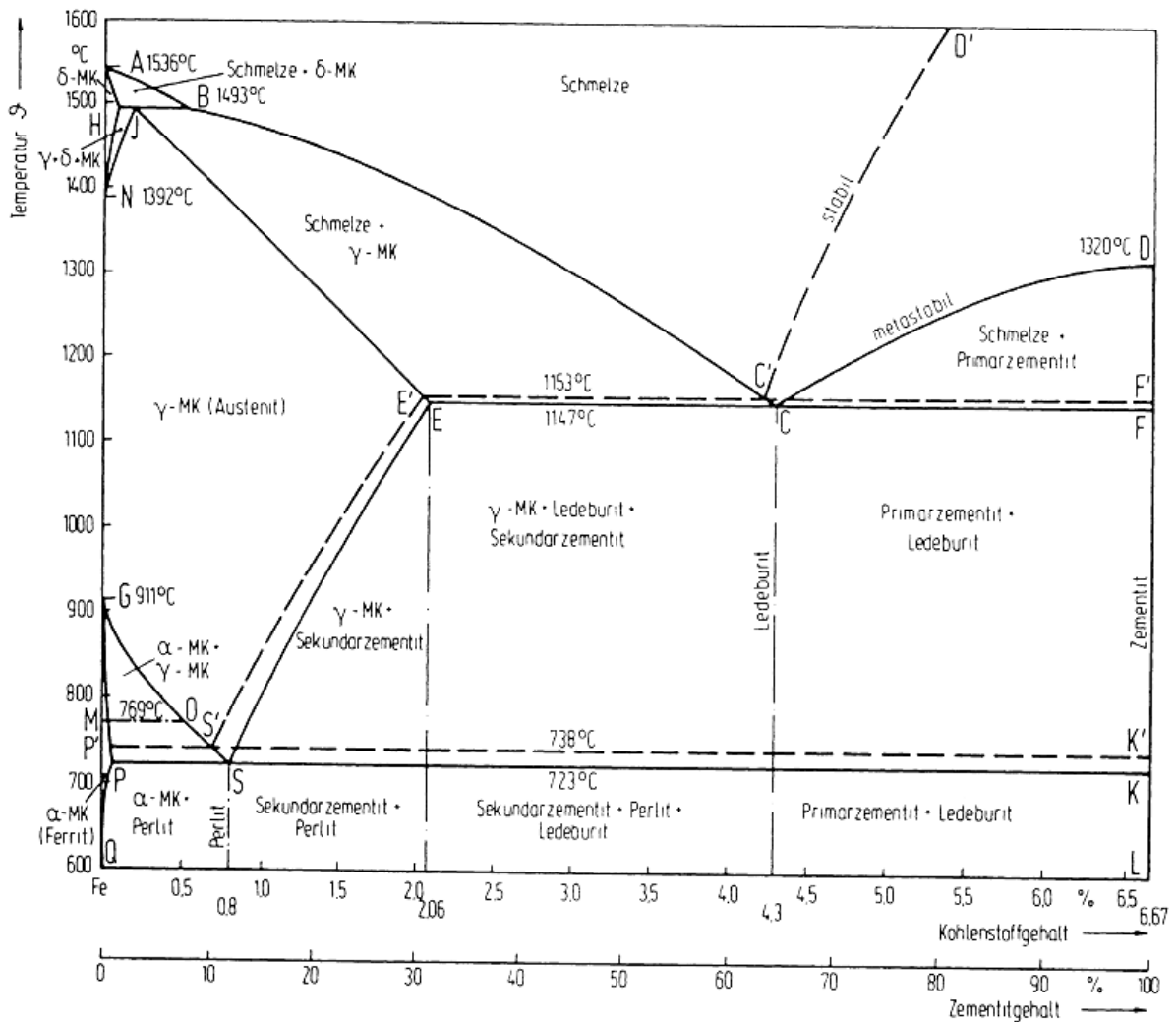
Reaktion am Eutektoid:  $\alpha \Leftrightarrow \beta + \gamma$

Eutektoid = Mischkristallzerfall im festen Zustand (vgl. Eutektikum, dort aber mit Schmelze!)



## 9) Reale Zustandsdiagramme

### 9.1 Eisen-Kohlenstoff-Diagramm



- Komponenten im stabilen System: Fe + C
- Komponenten im metastabilen System: Fe + Fe<sub>3</sub>C
- Gefüge-/Phasenbezeichnungen: α-MK: Ferrit (krz), γ-MK: Austenit (kfz), Fe<sub>3</sub>C: Zementit (intermetallische, metastabile Verbindung, die mit hoher Temperatur und zunehmender Zeit in Fe und C zerfällt), Perlit (lamellar erstarrtes eutektoides Gefüge aus α-MK und Fe<sub>3</sub>C), Ledeburit (eutektisch erstarrtes Gefüge mit feiner Verteilung von γ-MK und Fe<sub>3</sub>C)
- Nonvarianzen:
  - Punkt C – Eutektikum: S ⇌ γ-MK + Fe<sub>3</sub>C
  - Punkt S – Eutektoid: γ-MK ⇌ α-MK + Fe<sub>3</sub>C
  - Punkt J – Peritektikum: S + δ-MK ⇌ γ-MK
- Untereutektoider Stahl: Stahl mit 0,02 % bis 0,8 % C, z.B. 0,4 % C: 50 % voreutektoid ausgeschiedener Ferrit und 50 % Perlit (besteht aus 88 % Ferrit und 12 % Zementit)
- Eutektoider Stahl: Stahl mit 0,8% C (Punkt C) = Ferrit (besteht aus Ferrit und Zementit)
- Übereutektoider Stahl: Stahl mit 0,8 % bis 2,06 % C
- Maximale Löslichkeit von C in Austenit: 2,06 %
- Gusseisen: Eisen mit C-Gehalt über 2,06 %
- Schnelle Abkühlung: Thermodynamisches GG wird nicht mehr erreicht → Phasendiagramm nicht mehr komplett gültig; für untereutektoiden Stahl gilt: *bei mäßig schneller Abkühlung* wird voreutektoid entstehender Ferrit nicht gebildet, *bei Abschreckung* (z.B. Wasser) kann weder C noch Fe diffundieren → C bleibt zwangsgelöst und es entsteht eine extrem harte, aber spröde Phase (Martensit)
- Wärmebehandlungen beim Stahl: *Glühen*: Der Gefügestand nähert sich dem thermodynamischen GG; *Härten*: möglichst schnelle Abkühlung, um C im Gitter zu halten

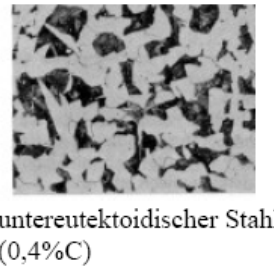
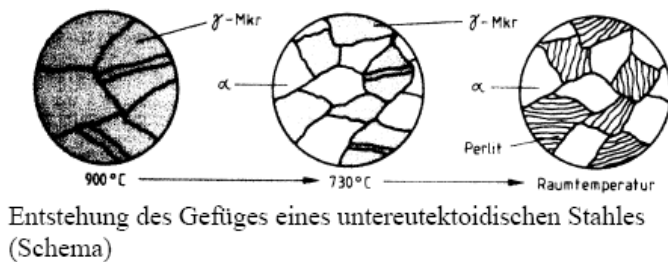


• Schematische Darstellung der Gefügebestandteile und wichtiger Vorgänge im EKS

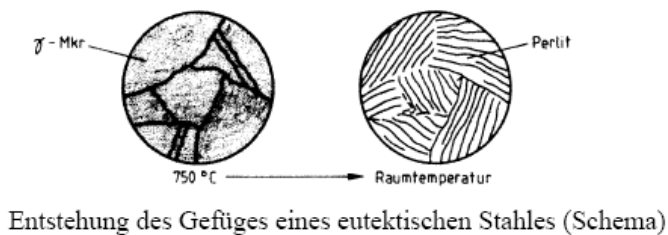
Bezeichnung	Nähere Kennzeichnung		Lage im EKS, Gefügeskizzen		
α-Mischkristall γ-MK δ-MK	Maximaler C-Gehalt	Metallografische Bezeichnung			
	0,02 %, Punkt P 2,06 %, Punkt E 0,1 %, Punkt H	α-Ferrit Austenit δ-Ferrit			
Eutektoid, Punkt S Eutektikum, Punkt C	besteht aus	Metallografische Bezeichnung			
	88 % Ferrit + + 12 % Zementit 51,4 % Austenit + 48,6 % Zementit	Perlit Ledeburit			
Primärzementit Sekundärzementit Tertiärzementit	entsteht durch				
	Primärkristallisation aus Schmelze (Linie CD) Ausscheidung aus Austenit (Linie ES) Ausscheidung aus Ferrit (Linie PQ)				

• Einteilung der Stähle

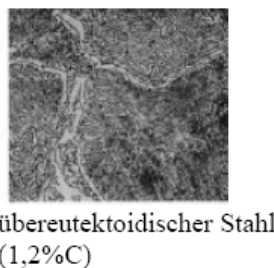
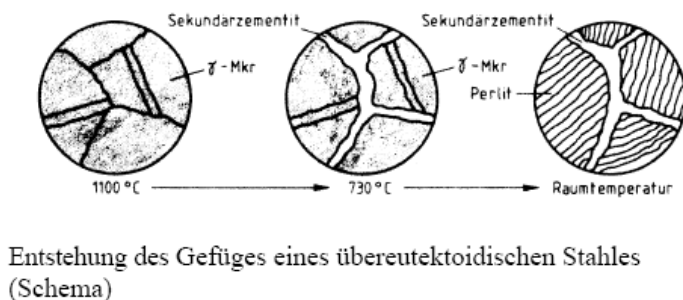
- untereutektoiden Stähle: C-Gehalt von 0,02% bis 0,8%; Gefüge: voreutektoid ausgeschiedener Ferrit; Perlit ( $Fe_3C + \alpha-Fe$ )



- eutektoiden Stähle: C-Gehalt 0,8%; Gefügebestandteil ist Perlit



- übereutektoiden Stähle: C-Gehalt von 0,8% bis 2,06%; Gefüge: Sekundärzementit und Perlit



## 10) Formelsammlung

- Dichte  $\rho = m / V$  ( $m$  = Masse [g],  $V$  = Volumen [ $\text{cm}^3$ ])
- Stoffmenge  $n = m / M$  ( $m$  = Masse [g],  $M$  = Molare Masse [g/mol])
- Atomanzahl  $N = m / M * N_A$  ( $N_A = 6,023 * 10^{23}$  Atome/mol = Avogadro-Zahl)
- Coulomb-Kraft  $F_C = (Z_1 * q * Z_2 * q) / (4\pi * \epsilon_0 * a_0^2)$  ( $Z_1, Z_2$  = Ladungen der Ionen,  $q = 1,6 * 10^{-19}$  C = Elementarladung,  $\epsilon_0 = 8,859 * 10^{-12}$  C<sup>2</sup>/Jm,  $a_0$  = Radius der gesamten Verbindung)
- Bragg'sche Gleichung:  $2 * d * \sin \varphi = n * \lambda$  ( $d$  = Gitterabstand [nm],  $\varphi$  = Winkel des Reflexes [°],  $n$  = Beugungsordnung (meistens 1),  $\lambda$  = Wellenlänge der Röntgenstrahlung [nm])
- Berechnung der Gitterkonstante  $a_0$  der unbekanntes Substanz:  
( $d$  = Gitterabstand,  $h, k, l$  = Reflex) 
$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$
- Vegardsche Regel:  $a_0 = a_0^A * c^A + a_0^B * c^B$  ( $a_0$  = gemeinsame Gitterkonstante,  $a_0^A$  = Gitterkonstante A,  $c^A$  = Konzentration A,  $a_0^B$  = Gitterkonstante B,  $c^B = 1 - c^A$  = Konzentration B)
- Elastizitätsmodul  $E$  [MPa] =  $\sigma / \epsilon$  (Hook'sches Gesetz;  $\sigma$  = Zugspannung [MPa],  $\epsilon$  = Dehnung)
- Zugspannung  $\sigma$  [MPa = N/mm<sup>2</sup>] =  $F / A$  ( $F$  = Kraft [N],  $A$  = Querschnittsfläche [mm<sup>2</sup>])
- Dehnung in Querrichtung  $\epsilon_x = -\nu * \epsilon_z$  ( $\nu$  = Querkontraktionszahl,  $\epsilon_z$  = Dehnung in Längsrichtung)
- Ohmscher Widerstand  $R$  [ $\Omega = V/A$ ] =  $U / I$  ( $U$  = Spannung [V],  $I$  = Stromstärke [A])
- Spezifische Leitfähigkeit  $\sigma$  [1/ $\Omega\text{m}$ ] =  $l_0 / (R * A)$  ( $l_0$  = Länge des Leiters [m],  $R$  = Ohmscher Widerstand [ $\Omega$ ],  $A$  = Querschnittsfläche [mm<sup>2</sup>])
- Elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$  [1/ $\Omega\text{m}$ ] =  $n * q * \mu$  ( $n$  = Anzahl der Ladungsträger,  $q = 1,602 * 10^{-19}$  C = Ladung des Ladungsträgers,  $\mu$  = Mobilität der Ladungsträger [m<sup>2</sup>/(Vs)])
- Einheitenrechnung: [C = As], [1/ $\Omega$  = A/V]
- Ausdehnungskoeffizient  $\alpha$  [1/K] =  $\Delta l / (l_0 * \Delta T)$  ( $\Delta l$  = Längenunterschied [mm],  $l_0$  = Anfangslänge [mm],  $\Delta T$  = Temperaturunterschied [K])
- Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_e = L * T * \sigma$  ( $L$  = Konstante,  $T$  = Temperatur [K],  $\sigma$  = elektrische Leitfähigkeit [1/ $\Omega\text{m}$ ]) (Wiedmann-Franz-Gesetz)
- Gesamte Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{\text{ges}} = \lambda_e + \lambda_G$  ( $\lambda_e$  = Elektronenwärmeleitfähigkeit,  $\lambda_G$  = Phononenwärmeleitfähigkeit)
- Gibbsche Phasenregel:  $F = K + 2 - P$  ( $K$  = Zahl der Komponenten,  $P$  = Zahl der Phasen,  $F$  = Zahl der Freiheitsgrade (die unabhängig voneinander verändert werden können ohne dass sich die Zahl der Phasen ändert))
- Tripelpunkt T:  $F = 0$ : Gleichgewicht aller 3 Phasen
- Hebelregel:  $(c_B^{\text{Kristall}} - c) / (c_B^{\text{Kristall}} - c_B^{\text{Schmelze}}) = \text{Menge an Schmelze}$   
Menge der anderen Phase:  $1 - \text{Menge an Schmelze}$