



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 8**

Vorlesungsstunde: 26.11.2020

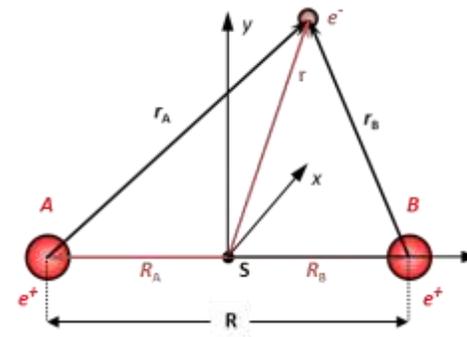
Zusammenfassung: Teil 7, 24.11.2020/1

• kovalente Bindung

- einfachstes Beispiel: **H₂⁺-Molekulation**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{R} \right) \right] \Psi(\mathbf{r}, R) = E \Psi(\mathbf{r}, R)$$

Wechselwirkungspotenzial



- Lösungsansatz:

$$\Psi(\mathbf{r}, R) = c_A \phi_A(\mathbf{r}_A) + c_B \phi_B(\mathbf{r}_B)$$

LCAO-Ansatz: Linear Combination of Atomic Orbitals

Atomorbitale

$$\Psi^s = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{AB}}} (\phi_A + \phi_B)$$

$$\Psi^a = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S_{AB}}} (\phi_A - \phi_B)$$

$$S_{AB} = \Re \int \phi_A^* \phi_B d^3r \quad (\text{Überlappintegral})$$

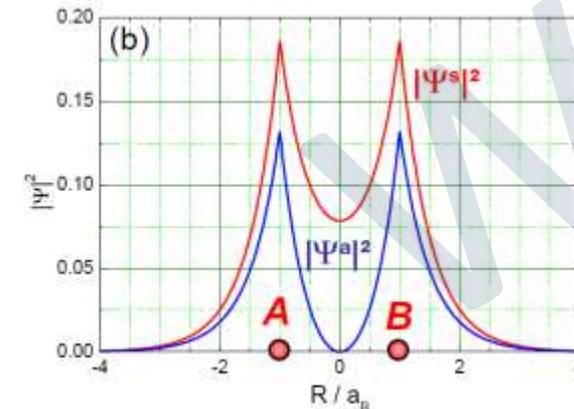
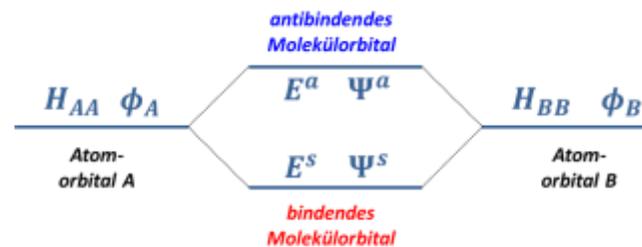
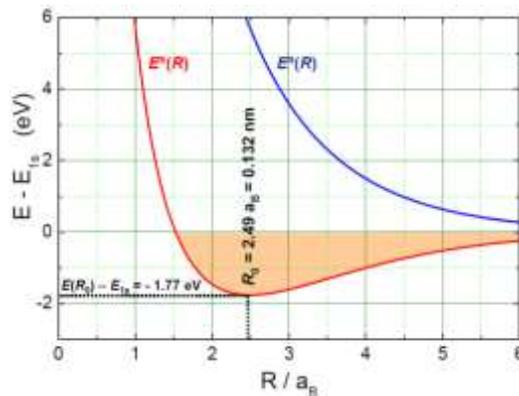
- Energiefunktionen

$$E^s(R) = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S_{AB}}$$

$$E^a(R) = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S_{AB}}$$

Coulombintegral (entsprechen klassischen Coulomb-Termen) Austauschintegral (ist rein qm Interferenzterm)

$$H_{AA} = H_{BB} = \int \phi_A^* \mathcal{H} \phi_A d^3r = \int \phi_B^* \mathcal{H} \phi_B d^3r \quad H_{AB} = H_{BA} = \int \phi_A^* \mathcal{H} \phi_B d^3r = \int \phi_B^* \mathcal{H} \phi_A d^3r$$



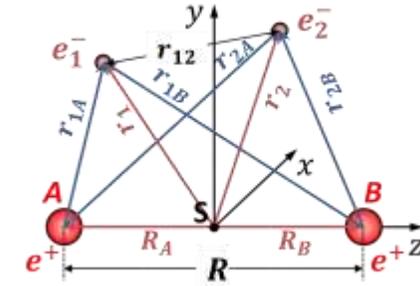
Zusammenfassung: Teil 7, 24.11.2020/2

• **kovalente Bindung**

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad \mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla_{e1}^2 + \nabla_{e2}^2] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{1A}} + \frac{1}{r_{2B}} \right)$$

- **H₂-Molekül:**

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} \right)$$



(mit antisymmetrischer Spin-Funktion)

- **Molekülorbitalnäherung:**

$$\Psi^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi^S(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi^S(\mathbf{r}_2) \quad \text{Produkt von Molekülorbitalen}$$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \Psi^S(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi^S(\mathbf{r}_2) \cdot \chi^a$$

Einsetzen von $\Psi^S \rightarrow$

$$\Psi^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2 + 2S_{AB}} [\phi_A(\mathbf{r}_1) + \phi_B(\mathbf{r}_1)] \cdot [\phi_A(\mathbf{r}_2) + \phi_B(\mathbf{r}_2)]$$

analog \rightarrow

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = [\Psi^S(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi^a(\mathbf{r}_2) - \Psi^S(\mathbf{r}_2) \cdot \Psi^a(\mathbf{r}_1)] \cdot \chi^s$$

- \rightarrow vernachlässigt WW zwischen beiden Elektronen
- \rightarrow berücksichtigt gleichzeitige Anw. beider El. an einem Kern

Einsetzen von $\Psi^S, \Psi^a \rightarrow$

$$\Psi^a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{1 - S_{AB}^2}} [\phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1) - \phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2)]$$

(mit symmetrischer Spin-Funktion)

- **Valenzbindungsnaherung:**
(Heitler-London)

$$\Psi_1 = c_1 \phi_A(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_2), \quad \Psi_2 = c_2 \phi_A(\mathbf{r}_2) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_1)$$

Produkt von Atomorbitalen

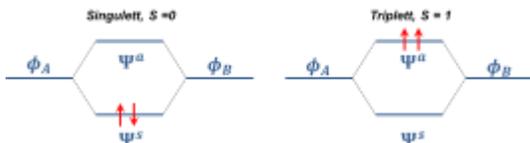
\rightarrow vernachlässigt gleichzeitige Anwesenheit beider El. an einem Kern

sym. oder antisym.
Gesamt-WF \rightarrow

$$\Psi^{S,a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_1 \pm \Psi_2 = c ([\phi_A(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_2)] \pm [\phi_A(\mathbf{r}_2) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_1)])$$

Normierung \rightarrow

$$\Psi^{S,a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2 \pm 2S_{AB}}} [\phi_A(\mathbf{r}_1) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_2)] \pm [\phi_A(\mathbf{r}_2) \cdot \phi_B(\mathbf{r}_1)]$$



$$E^S(R) = 2E_{1s} + \frac{V + A}{1 + S}$$

$$E^a(R) = 2E_{1s} + \frac{V - A}{1 - S}$$

$$\begin{aligned} V &= \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_A^*(\mathbf{r}_1)\phi_B^*(\mathbf{r}_2) \hat{H}_1 \phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) \\ &= \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_A^*(\mathbf{r}_2)\phi_B^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}_1 \phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1) \\ A &= \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_A^*(\mathbf{r}_1)\phi_B^*(\mathbf{r}_2) \hat{H}_1 \phi_A(\mathbf{r}_2)\phi_B(\mathbf{r}_1) \\ &= \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_A^*(\mathbf{r}_2)\phi_B^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}_1 \phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

Coulomb-Integral

Austausch-Integral

• Hybridisierung

- Beimischung energetisch höher liegender Orbitale zur Optimierung der Bindungsenergie
- wichtig für Kohlenstoffchemie: sp , sp^2 und sp^3 -Hybridisierung

• metallische Bindung

- Valenzelektronen sind über ganzen Kristall verschmiert (delokalisierte Leitungselektronen)
- Bindungsenergie resultiert hauptsächlich aus der Reduktion der kinetischen Energie der Leitungselektr.

Modell: freie Leitungselektronen, die mit abgeschirmtem Coulomb-Pot. der Ionenrümpfe wechselwirken

$$\left. \begin{array}{l} \text{kin. Energie: } E_{\text{kin}} \approx 2.21 \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} \left(\frac{a_B}{r_A}\right)^2 \\ \text{pot. Energie: } E_{\text{pot}} \approx -\frac{9}{5} \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} \left(\frac{a_B}{r_A}\right) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Minimum von } E_{\text{tot}} \text{ für} \\ \frac{r_{A,0}}{a_B} \approx 2.45, \quad r_{A,0} \approx 1.3 \text{ \AA} \end{array}$$

Erweiterungen durch Berücksichtigung von e-e-WW:

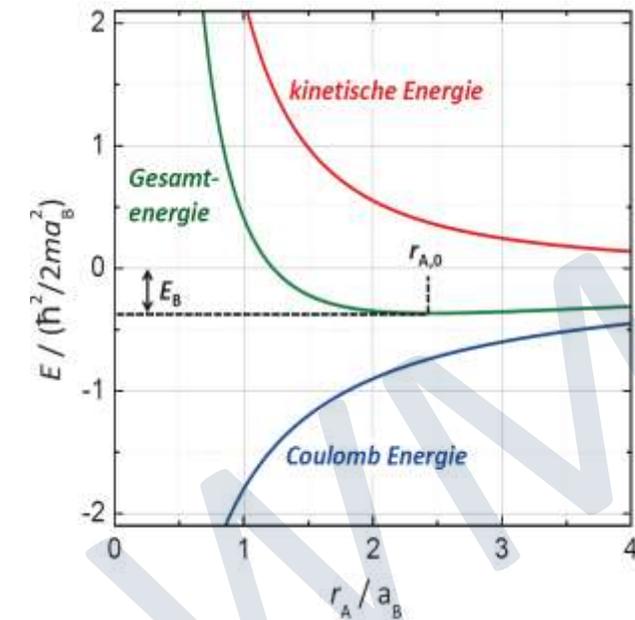
- **Austauschenergie**
- **Korrelationsenergie**
- **Benutzung von Pseudo-Potenzial**

• Wasserstoffbrückenbindung

- ionische/kovalente Bindung von H-Atom mit zwei elektronegativen Partnern
- Bindung nur mit 2 Partnern, da H^+ -Ion sehr klein, kleine Bindungsenergie wegen geringer Zahl der Bindungspartner

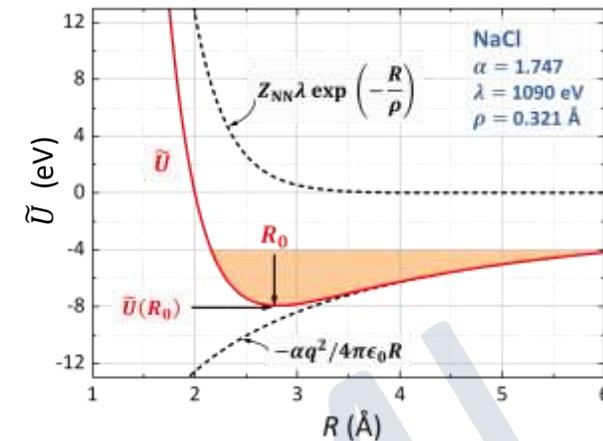
• Atom- und Ionenradien

- Abschätzung von Gitterkonstanten und Kristallstrukturen durch Approximation mit Kugeln



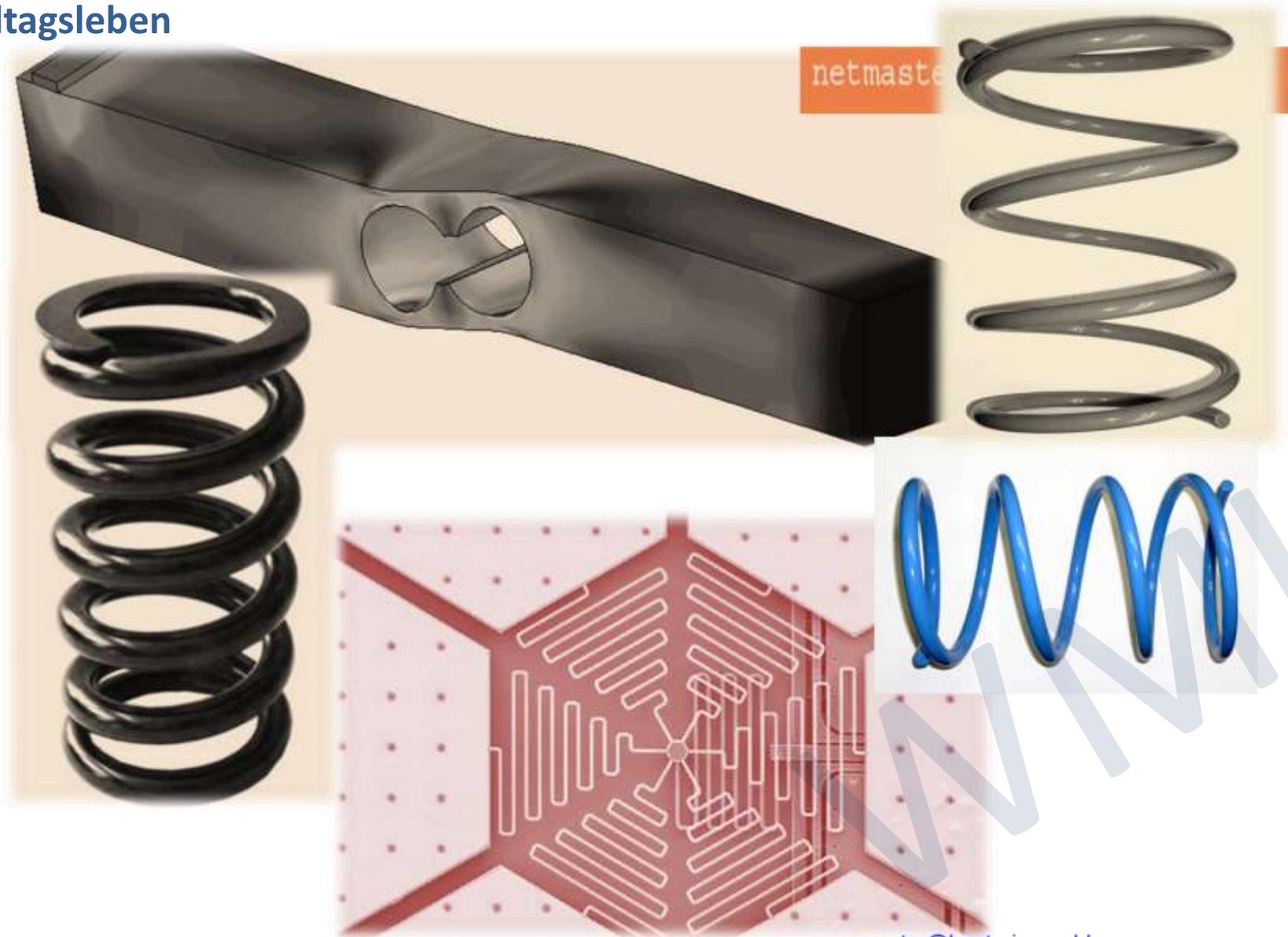
4 Elastische Eigenschaften

- Bisher:
 - Bindungskräfte** → bestimmen Gleichgewichtsabstand R_0 der Atome ohne Wirkung von äußeren Kräften
- Jetzt:
 - **Was passiert beim Wirken einer äußeren mechanischen Kraft ?**
 - **Änderung des Gleichgewichtsabstands R_0 , Verformung des Festkörpers**
- bei Auslenkung aus Ruhelage wirkt auf Atome **Rückstellkraft** $F = -\partial U / \partial R$ falls $R \neq R_0$
 - um Verformung zu erzielen, müssen wir Kraft wirken lassen
- wir betrachten Festkörper als **elastisches Kontinuum**
 - atomare Struktur wird außer Acht gelassen
 - wir betrachten nur Vorgänge auf Skala $\gg \text{Å}$ (Atomabstand)
 - Wellenlänge der Störung \gg Atomabstand
 - Beispiel: elastische Welle
 - Schallgeschwindigkeit $c \simeq 10^3 - 10^4 \text{ m/s}$
 - Wellenlänge $\lambda > 100 \text{ Å}$ bzw. $f = c/\lambda < 10^{11} - 10^{12} \text{ Hz}$
- Diskussion von Vorgängen auf atomarer Längenskala erfolgt später → **Kapitel 5 (Phononen)**



4 Elastische Eigenschaften

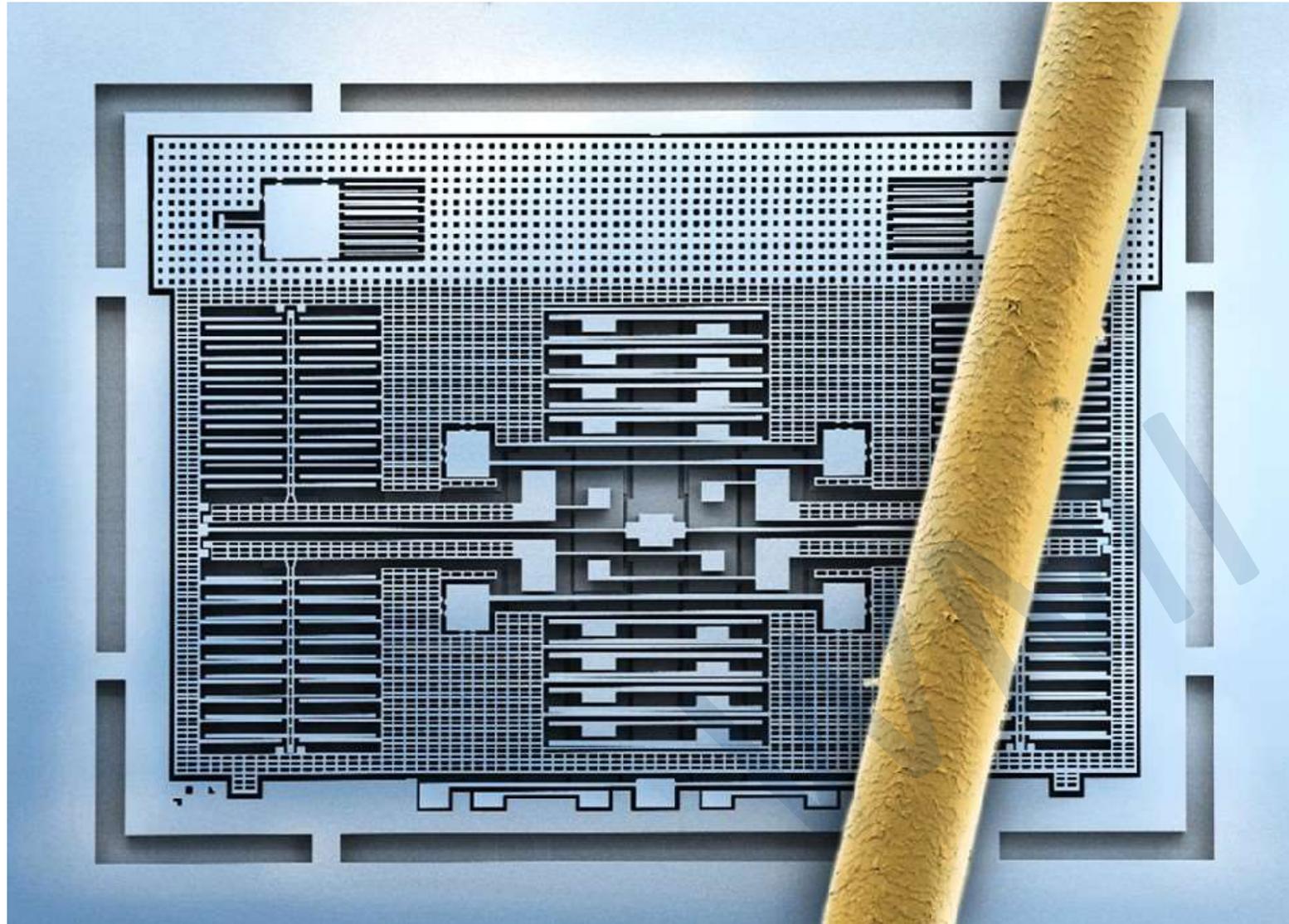
- große Bedeutung fürs Alltagsleben



4 Elastische Eigenschaften

- Bosch baut in Dresden Großfabrik für Autoelektronik

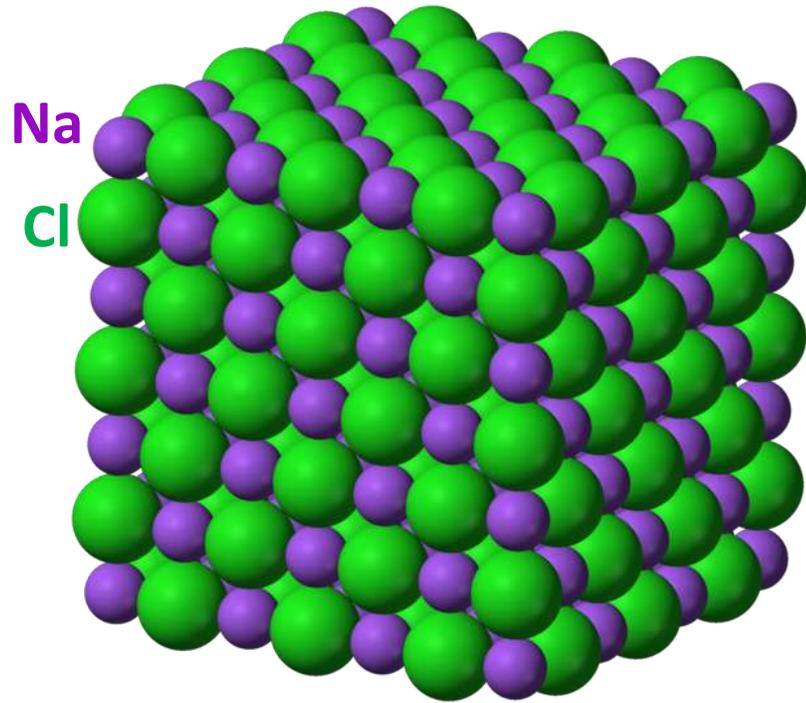
(veröffentlicht am 14. Juni 2017)



MEMS Produktion auf 300 mm Wafern

MEMS: micro-electro-mechanical systems

4 Elastische Eigenschaften - Kontinuumsbeschreibung



FK als periodische Anordnung von
Atomen



FK als Kontinuum

typische Längenskala von physikalischen Prozessen \gg Atomabstand

Wellenlänge \gg 1 Ångström

4 Elastische Eigenschaften - Kontinuumsbeschreibung

- elastische Wellen:

$$\lambda \simeq 1 \text{ m} \quad @ f = 1 \text{ kHz}$$

$$\lambda \simeq 1 \text{ mm} \quad @ f = 1 \text{ MHz}$$

$$\lambda \simeq 1 \text{ }\mu\text{m} \quad @ f = 1 \text{ GHz}$$

$$\lambda = \frac{v_s}{f} \quad \text{Schallgeschwindigkeit } v_s \simeq 1\,000 \text{ m/s}$$

- elektromagnetische Wellen:

$$\lambda \simeq 100 \text{ km} \quad @ f = 1 \text{ kHz}$$

$$\lambda \simeq 100 \text{ m} \quad @ f = 1 \text{ MHz}$$

$$\lambda \simeq 100 \text{ mm} \quad @ f = 1 \text{ GHz}$$

$$\lambda \simeq 100 \text{ }\mu\text{m} \quad @ f = 1 \text{ THz}$$

$$\lambda \simeq 100 \text{ nm} \quad @ f = 1 \text{ PHz}$$

$$\lambda = \frac{\bar{c}}{f} \quad \text{Lichtgeschwindigkeit } \bar{c} \simeq 10^8 \text{ m/s}$$

4 Elastische Eigenschaften – lineare Antworttheorie

- wir betrachten nur die lineare Antwort des Festkörpers auf eine Störung

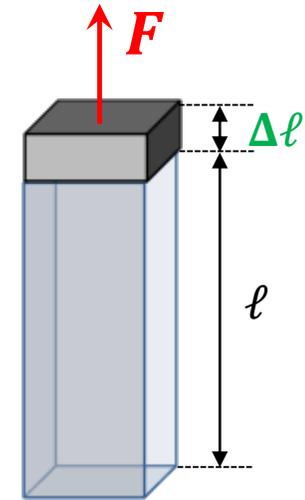
Beispiel: lineare Antwort auf mechanische Kraft
(Hookescher Bereich)

Störung = Kraft F (Spannung $\sigma = F/A$)

Antwort = Längenänderung $\Delta\ell \propto F$

$$\Rightarrow \Delta\ell = \gamma \cdot F$$

γ = Kontinuumseigenschaft (Materialkonstante)



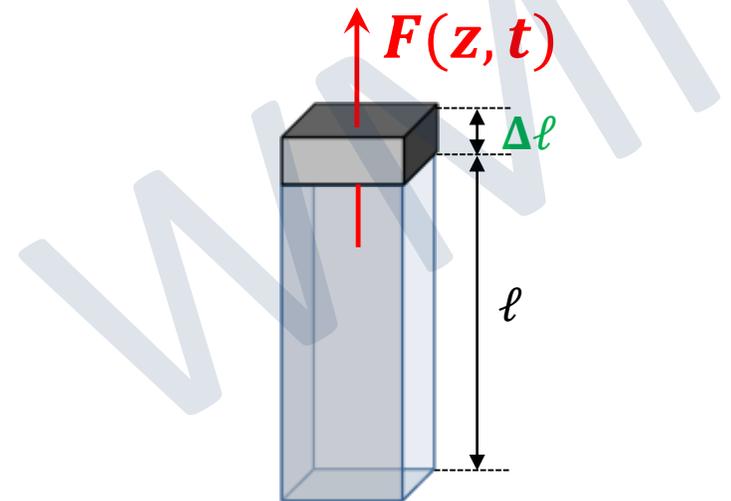
orts- und zeitabhängige Kraft:

$$\Delta\ell(z', t') = \int \underbrace{\gamma(z - z', t - t')}_{\text{Suszeptibilität}} \cdot F(z, t) dz dt$$

Suszeptibilität

=

Empfindlichkeit auf Störung



4 Elastische Eigenschaften – lineare Antworttheorie

- Beispiele

Antwort	Störung	verallg. Suszeptibilität
Volumenausdehnung $\Delta V/V$	Druck $p = F/A$	Kompressibilität κ $\Delta V/V = -\kappa p$
Elektrische Stromdichte \vec{J}_q	elektrisches Feld \vec{E}	elektrische Leitfähigkeit σ $\vec{J}_q = \sigma \vec{E}$
Wärmestromdichte \vec{J}_h	T -Gradient $\vec{\nabla}T$	Wärmeleitfähigkeit κ_h $\vec{J}_h = -\kappa_h \vec{\nabla}T$
Polarisation \vec{P}	elektrisches Feld \vec{E}	elektrische Suszeptibilität χ_{el} $\vec{P} = \chi_{el} \epsilon_0 \vec{E}$
Magnetisierung \vec{M}	magnetisches Feld \vec{H}	magn. Suszeptibilität χ_{mag} $\mu_0 \vec{M} = \chi_{mag} \mu_0 \vec{H}$

verallgemeinerte Suszeptibilität = Kontinuumseigenschaft

4 Elastische Eigenschaften – lineare Antworttheorie

- isotrope Festkörper:

verallgemeinerte Suszeptibilitäten sind Zahlen

$$\vec{J}_q = \sigma \vec{E} \quad \Rightarrow \quad (J_{q,x}, J_{q,y}, J_{q,z}) = \sigma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

- anisotrope Festkörper:

verallgemeinerte Suszeptibilitäten sind Tensoren

$$\vec{J}_q = \hat{\sigma} \vec{E} \quad \Rightarrow \quad (J_{q,x}, J_{q,y}, J_{q,z}) = \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}}_{\text{Leitfähigkeitstensor}} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

Leitfähigkeitstensor
(Tensor 2. Stufe)

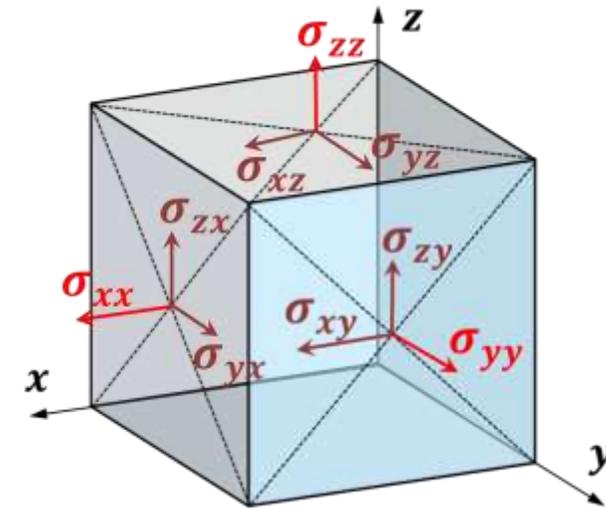
Symmetrie des Festkörpers: Reduktion der unabhängigen Komponenten

4 Elastische Eigenschaften – lineare Antworttheorie

- elastische Eigenschaften von Festkörper

Störung = Spannung $\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$

Antwort = Dehnung $\hat{e} = \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{pmatrix}$



Verallgemeinerte Suszeptibilität = Compliance-Tensor \hat{S}

$$e_{ij} = \sum_{kl} S_{ijkl} \sigma_{kl}$$

$$\begin{aligned} e_{xx} = & S_{xxxx}\sigma_{xx} + S_{xxxy}\sigma_{xy} + S_{xxxz}\sigma_{xz} \\ & + S_{xxyx}\sigma_{yx} + S_{xxyy}\sigma_{yy} + S_{xxyz}\sigma_{yz} \\ & + S_{xxzx}\sigma_{zx} + S_{xxzy}\sigma_{zy} + S_{xxzz}\sigma_{zz} \end{aligned}$$

(Tensor 4. Stufe, 81 Komponenten)



Reduktion durch
Symmetrie des FK

3 unabhängige Komponenten
für kubische Symmetrie

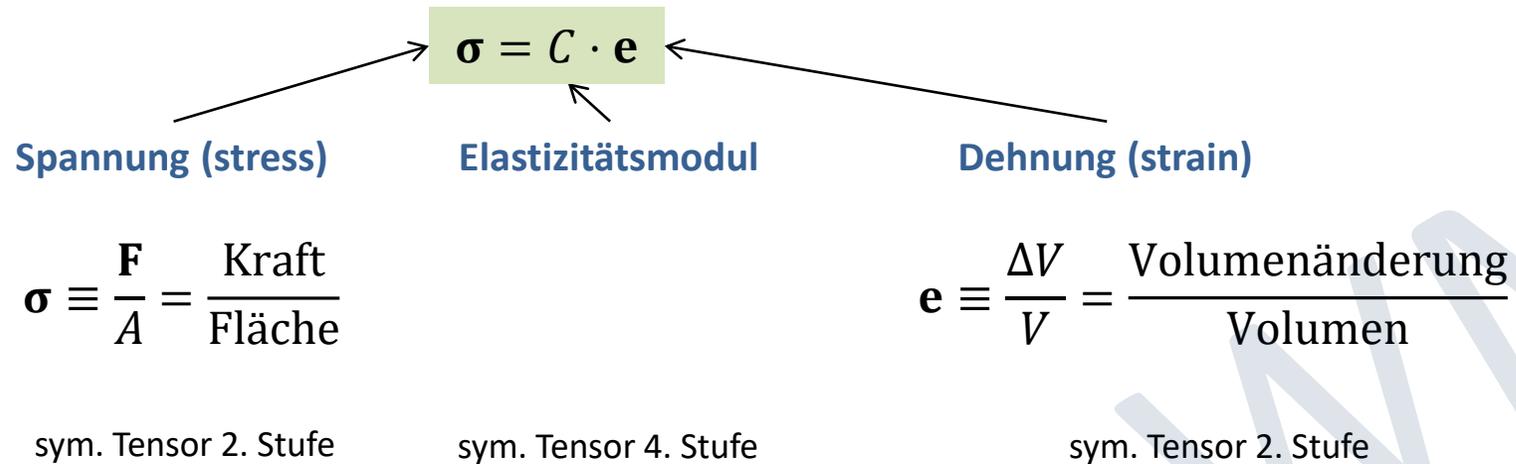
4.1 Elastische Eigenschaften – Grundlagen

- elastische und plastische Verformung

- elastische Verformung: *reversibler Verformungsprozess*
- plastische Verformung: *irreversibler Verformungsprozess*

➔ Beschränkung auf *elastischen Bereich*

- Hookesches Gesetz:** *linearer Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung*



4.2 Spannung und Dehnung

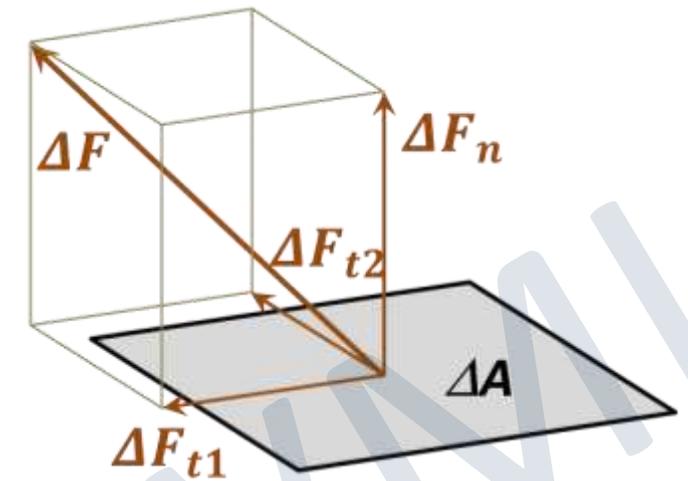
4.2.1 Der Spannungstensor

- **Spannung** → innere Kraft pro Flächenelement in FK
 → Beschreibung anhand von infinitesimalen Volumenelementen, die unter Kraftwirkung eine Deformation erleiden

- Zerlegung von Kraft $\Delta \mathbf{F}$ auf Fläche A in Normal- und Tangentialanteil

→ **Normalspannung:** $\Delta \mathbf{F}_n / \Delta A$

→ **Schub- oder Tangentialspannung:** $\Delta \mathbf{F}_{t1} / \Delta A$ und $\Delta \mathbf{F}_{t2} / \Delta A$



4.2.1 Spannungstensor

- Angabe des Spannungszustandes durch 9 Größen → **Spannungstensor**

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{ij} \equiv \frac{\text{Kraftkomponente in } i - \text{Richtung}}{\text{Fläche mit Normalkomponente in } j - \text{Richtung}}$$

- Diagonalelemente: **Normalspannungen**
- Nebendiagonalelemente: **Schubspannungen**

- Zahl der unabhängigen Komponenten:

➤ es sollen keine Dreh- oder Translationsbewegungen induziert werden

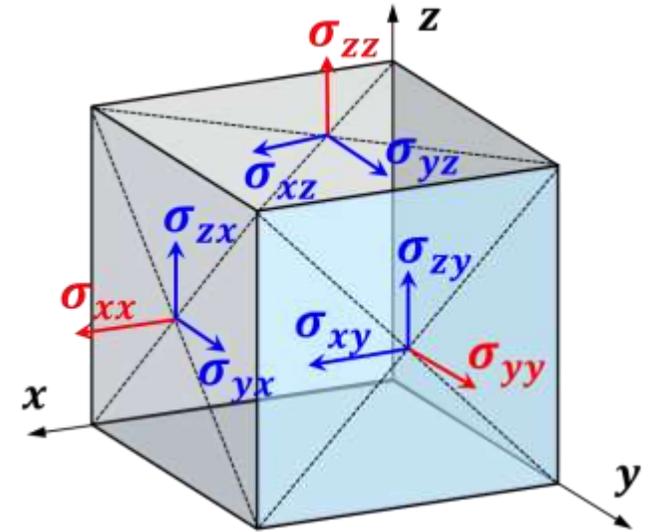
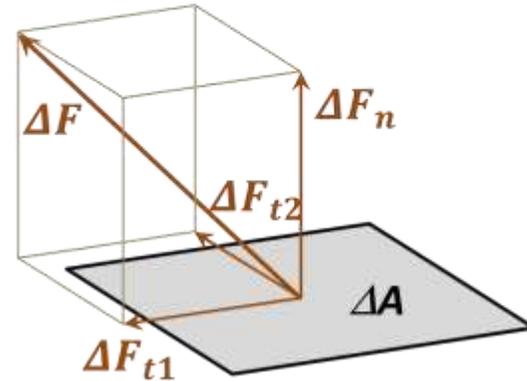
➔ **keine Translation:**

Spannungen auf entgegengesetzte Flächen gleich und mit umgekehrtem Vorzeichen

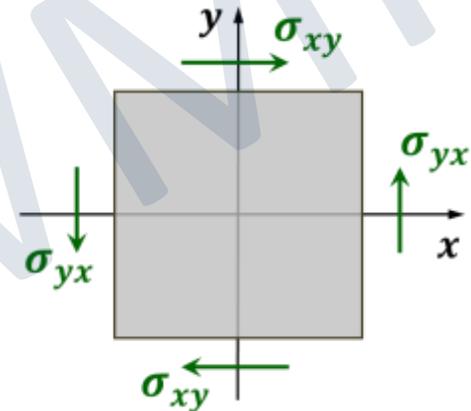
➔ **keine Rotation:** $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

➔ nur **6 unabhängige Komponenten:** 3 Normalspannungen und 3 Schubspannungen

➔ **symmetrischer Tensor 2. Stufe**



Wichtig: auf gegenüberliegende Würfelseite wirkt die gleiche Kraft, da Würfel infinitesimal klein ist



4.2.1 Spannungstensor

• elementare Belastungsfälle

Zug, Druck:

keine Schubspannungen, Kraft wirkt gleichmäßig

→ Reaktion des Körpers:

Dehnung (a) und Querdehnung (b)

Volumenänderung (c) bei isotropem Druck

Biegung:

keine Schubspannungen, Kraft wirkt ungleichmäßig

→ Reaktion des Körpers:

ungleichmäßige Verformung (d)

Scherung:

keine Normalspannungen,

Kraft wirkt parallel zur Oberfläche

→ Reaktion des Körpers:

Scherung (e), Winkeländerung

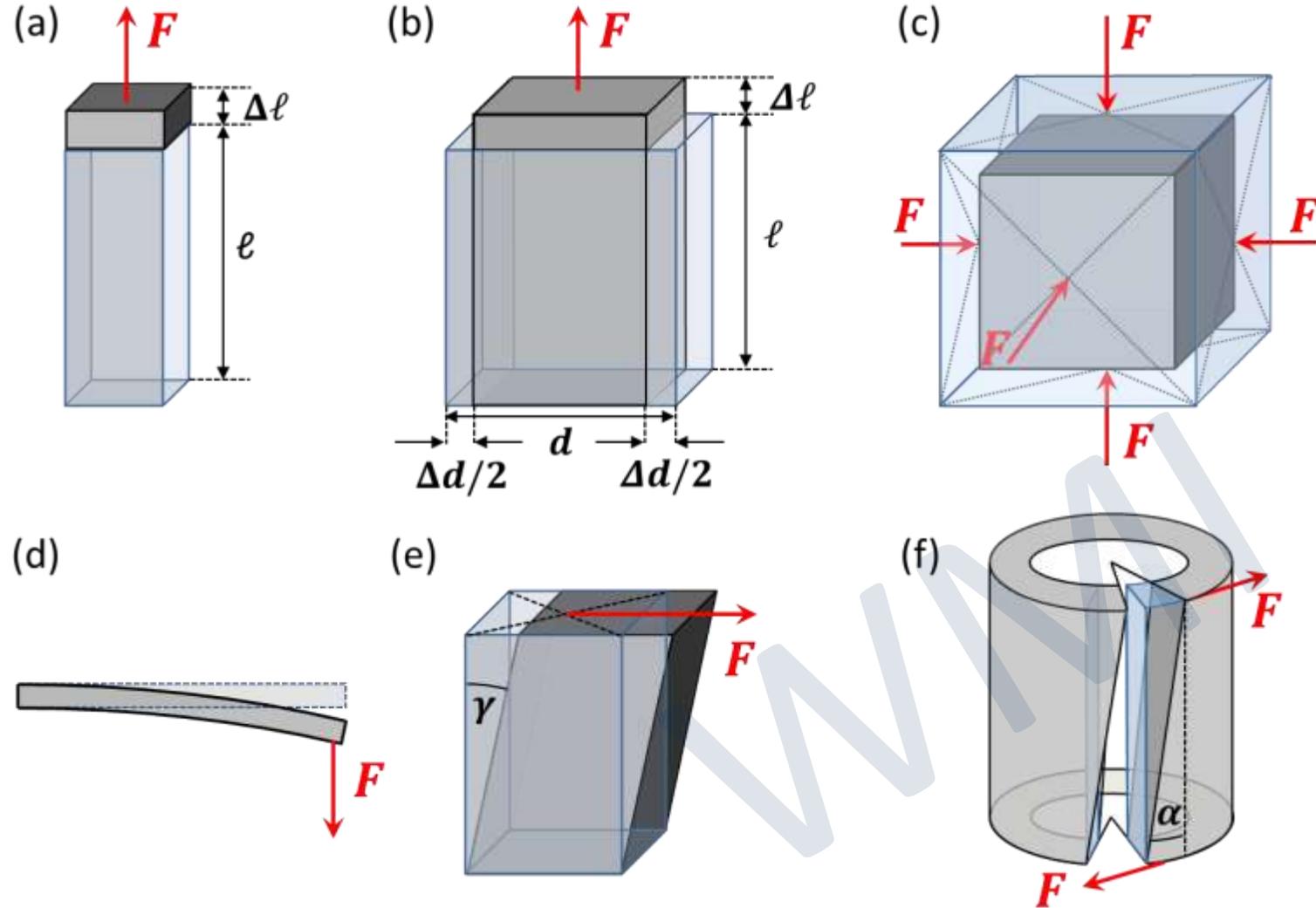
Torsion:

keine Normalspannungen,

Kraft wirkt in unterschiedliche Richtungen

→ Reaktion des Körpers:

Verdrillung (f)



4.2.2 Dehnungskomponenten

- Wie definieren wir die Dehnungskoeffizienten für einen 3D-Festkörper?

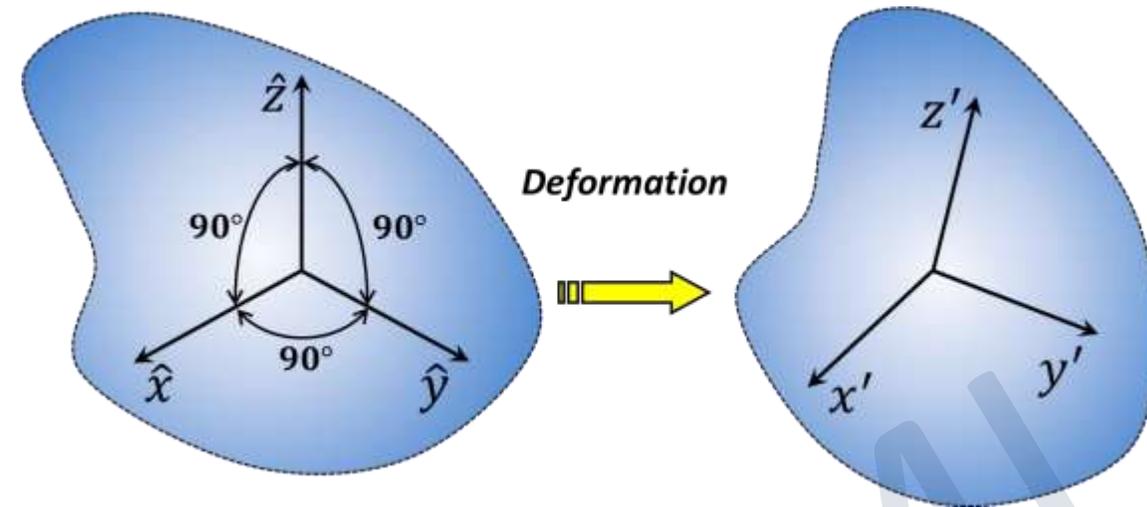
- wir betrachten dazu die gleichmäßige **Deformation eines orthogonalen Koordinatensystems**

$$\mathbf{x}' = (1 + \epsilon_{xx}) \hat{\mathbf{x}} + \epsilon_{xy} \hat{\mathbf{y}} + \epsilon_{xz} \hat{\mathbf{z}}$$

$$\mathbf{y}' = \epsilon_{yx} \hat{\mathbf{x}} + (1 + \epsilon_{yy}) \hat{\mathbf{y}} + \epsilon_{yz} \hat{\mathbf{z}}$$

$$\mathbf{z}' = \epsilon_{zx} \hat{\mathbf{x}} + \epsilon_{zy} \hat{\mathbf{y}} + (1 + \epsilon_{zz}) \hat{\mathbf{z}}$$

Koeffizienten $\epsilon_{ij} \ll 1$ beschreiben Deformation



- für Länge der neuen Vektoren \mathbf{x}' , \mathbf{y}' und \mathbf{z}' gilt:

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' = 1 + 2\epsilon_{xx} + \epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2$$

$$\mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}' = \epsilon_{yx}^2 + 1 + 2\epsilon_{yy} + \epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{yz}^2$$

$$\mathbf{z}' \cdot \mathbf{z}' = \epsilon_{zx}^2 + \epsilon_{zy}^2 + 1 + 2\epsilon_{zz} + \epsilon_{zz}^2$$

$$\begin{array}{c} \epsilon_{ij} \ll 1 \\ \xrightarrow{\hspace{2cm}} \\ \sqrt{1+x} \simeq 1 + \frac{1}{2}x \end{array}$$

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' \simeq 1 + 2\epsilon_{xx} \Rightarrow x' \simeq 1 + \epsilon_{xx}$$

$$\mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}' \simeq 1 + 2\epsilon_{yy} \Rightarrow y' \simeq 1 + \epsilon_{yy}$$

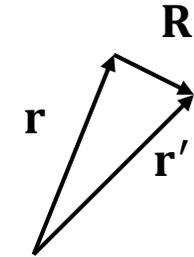
$$\mathbf{z}' \cdot \mathbf{z}' \simeq 1 + 2\epsilon_{zz} \Rightarrow z' \simeq 1 + \epsilon_{zz}$$

➔ in 1. Ordnung ist die relative Änderungen der Länge der Einheitsvektoren gegeben durch ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz}

4.2.2 Dehnungskomponenten

- Auswirkung von Verformung auf Position $\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{x}} + y \hat{\mathbf{y}} + z \hat{\mathbf{z}}$ eines Atoms

Position nach Verformung: $\mathbf{r}' = x\mathbf{x}' + y\mathbf{y}' + z\mathbf{z}'$



- Einführung von **Verschiebungsvektor** $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = x (\mathbf{x}' - \hat{\mathbf{x}}) + y (\mathbf{y}' - \hat{\mathbf{y}}) + z (\mathbf{z}' - \hat{\mathbf{z}})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = (x\epsilon_{xx} + y\epsilon_{yx} + z\epsilon_{zx}) \hat{\mathbf{x}} + (x\epsilon_{xy} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{zy}) \hat{\mathbf{y}} + (x\epsilon_{xz} + y\epsilon_{yz} + z\epsilon_{zz}) \hat{\mathbf{z}}$$

- Beschreibung mit **allgemeinem Verschiebungsvektor**:

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{x}} + v(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{y}} + w(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}$$

↑ ↑ ↑
bestimmt durch lokale Deformation

- Taylor-Entwicklung von Verschiebungsvektor $\mathbf{R}(\mathbf{r})$ um $\mathbf{r} = 0$ (Annahme: $\mathbf{R}(0) = 0$)

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \left(x \frac{\partial u}{\partial x} + y \frac{\partial u}{\partial y} + z \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(x \frac{\partial v}{\partial x} + y \frac{\partial v}{\partial y} + z \frac{\partial v}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{y}} + \left(x \frac{\partial w}{\partial x} + y \frac{\partial w}{\partial y} + z \frac{\partial w}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{z}} + \dots$$

- Vergleich liefert $x\epsilon_{xx} \simeq x \frac{\partial u}{\partial x}$, $y\epsilon_{yx} \simeq y \frac{\partial u}{\partial y}$, $z\epsilon_{zx} \simeq z \frac{\partial u}{\partial z}$, $x\epsilon_{xy} \simeq x \frac{\partial v}{\partial x}$, $y\epsilon_{yy} \simeq y \frac{\partial v}{\partial y}$, ...

4.2.2 Dehnungskomponenten

- Einführung von **Dehnungskoeffizienten** e_{kl}

Dehnungskoeffizienten sind gegeben durch die partiellen Ableitungen der Komponenten von \mathbf{R} nach x, y, z

$$e_{xx} = \frac{1}{2} \mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$e_{yy} = \frac{1}{2} \mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$e_{zz} = \frac{1}{2} \mathbf{z}' \cdot \mathbf{z}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

(Längenänderung der neuen Koordinatenachsen)

$$e_{xy} = \frac{1}{2} \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{yx} + \epsilon_{xy}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

$$e_{yz} = \frac{1}{2} \mathbf{y}' \cdot \mathbf{z}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{zy} + \epsilon_{yz}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

$$e_{zx} = \frac{1}{2} \mathbf{z}' \cdot \mathbf{x}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{zx} + \epsilon_{xz}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)$$

(Änderungen der Winkel zwischen den Koordinatenachsen)



$$\hat{\mathbf{e}} = \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{pmatrix}$$

aus Symmetriegründen gilt: $e_{kl} = e_{lk}$

symmetrischer Tensor 2. Stufe

Dehnungskoeffizienten e_{kl} bestimmen Dehnung vollständig

4.2.2 Dehnungskomponenten

- **Beispiel:** Volumenänderung von Kristall aufgrund von hydrostatischem Druck

– Volumen nach Druckanwendung: $V' = (\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}') \times \mathbf{z}'$ $V = (\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{y}}) \times \hat{\mathbf{z}} = 1$

– wir benutzen:

$$\mathbf{x}' = (1 + \epsilon_{xx}) \hat{\mathbf{x}} + \epsilon_{xy} \hat{\mathbf{y}} + \epsilon_{xz} \hat{\mathbf{z}}$$

$$\mathbf{y}' = \epsilon_{yx} \hat{\mathbf{x}} + (1 + \epsilon_{yy}) \hat{\mathbf{y}} + \epsilon_{yz} \hat{\mathbf{z}}$$

$$\mathbf{z}' = \epsilon_{zx} \hat{\mathbf{x}} + \epsilon_{zy} \hat{\mathbf{y}} + (1 + \epsilon_{zz}) \hat{\mathbf{z}}$$

$$V' = (\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}') \times \mathbf{z}' = \begin{vmatrix} 1 + e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & 1 + e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & 1 + e_{zz} \end{vmatrix} \simeq V + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

- **Dilatation oder Volumenausdehnung**

$$\delta = \frac{V' - V}{V} \simeq e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

(bei Anwendung von Druck ist δ negativ)

Produkte von Dehnungskoeffizienten werden vernachlässigt

4.3 Elastizitäts- und Compliancetensor

- Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung (im Hookeschen Bereich)
 - gegeben durch Elastizitätstensor C_{ijkl} (Youngs's Modulus) bzw. Compliancetensor S_{ijkl} (Nachgiebigkeitstensor)

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} e_{kl}$$

$$e_{ij} = \sum_{kl} S_{ijkl} \sigma_{kl}$$

Spannungskomponenten,
bilden sym. Tensor 2. Stufe

Dehnungskomponenten,
bilden sym. Tensor 2. Stufe

Elastizitätstensor (Elastizitätsmoduln)

81 Komponenten

Compliance-Tensor (elastische Konstanten)

81 Komponenten

- Symmetriebeziehungen:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \text{ und } e_{kl} = e_{lk} \text{ sowie } C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}$$

→ Reduktion auf **36 Komponenten**

→ **Voigt-Notation**



4.3 Elastizitäts- und Compliancetensor

- Voigt-Notation

– vereinfachte Schreibweise durch Einführung der Beziehungen

$$xx \rightarrow 1, \quad yy \rightarrow 2, \quad zz \rightarrow 3, \quad yz = zy \rightarrow 4, \quad xz = zx \rightarrow 5, \quad xy = yx \rightarrow 6$$

Tensor-
Notation

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} e_{kl}$$



$$\sigma_m = \sum_{n=1}^6 C_{mn} e_n$$

Matrix-
Notation

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= C_{xxxx}e_{xx} + C_{xxxy}e_{xy} + C_{xxxz}e_{xz} \\ &\quad + C_{xxyx}e_{yx} + C_{xxyy}e_{yy} + C_{xxyz}e_{yz} \\ &\quad + C_{xxzx}e_{zx} + C_{xxzy}e_{zy} + C_{xxzz}e_{zz} \\ &= C_{xxxx}e_{xx} + C_{xxyy}e_{yy} + C_{xxzz}e_{zz} \\ &\quad + 2C_{xxyz}e_{yz} + 2C_{xxxz}e_{xz} + 2C_{xxxy}e_{xy} \end{aligned}$$



$$\sigma_1 = C_{11}e_1 + C_{12}e_2 + C_{13}e_3 + 2C_{14}e_4 + 2C_{15}e_5 + 2C_{16}e_6$$

Koeffizientenvergleich ergibt:

$$\begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} e_1 & \frac{1}{2}e_6 & \frac{1}{2}e_5 \\ \frac{1}{2}e_6 & e_2 & \frac{1}{2}e_4 \\ \frac{1}{2}e_5 & \frac{1}{2}e_4 & e_3 \end{pmatrix}$$

durch die zusätzlichen Faktoren bei e_4, e_5 und e_6 bleibt bei der Transformation die Energiedichte erhalten

4.3 Elastizitäts- und Compliancetensor

- Voigt-Notation

$$\sigma_m = \sum_{n=1}^6 C_{mn} e_n$$



$$\begin{aligned} \sigma_1 &= C_{11}e_1 + C_{12}e_2 + C_{13}e_3 + C_{14}e_4 + C_{15}e_5 + C_{16}e_6 \\ \sigma_2 &= C_{21}e_1 + C_{22}e_2 + C_{23}e_3 + C_{24}e_4 + C_{25}e_5 + C_{26}e_6 \\ \sigma_3 &= C_{31}e_1 + C_{32}e_2 + C_{33}e_3 + C_{34}e_4 + C_{35}e_5 + C_{36}e_6 \\ \sigma_4 &= C_{41}e_1 + C_{42}e_2 + C_{43}e_3 + C_{44}e_4 + C_{45}e_5 + C_{46}e_6 \\ \sigma_5 &= C_{51}e_1 + C_{52}e_2 + C_{53}e_3 + C_{54}e_4 + C_{55}e_5 + C_{56}e_6 \\ \sigma_6 &= C_{61}e_1 + C_{62}e_2 + C_{63}e_3 + C_{64}e_4 + C_{65}e_5 + C_{66}e_6 \end{aligned}$$

- 6 x 6 Matrix mit 36 Koeffizienten C_{mn}

- Koeffizienten C_{mn} : *Elastizitätsmoduln*

- Koeffizienten S_{mn} : *elastische Konstanten*
(der zu C_{mn} inversen Matrix)

$$\sigma_m = \sum_{n=1}^6 C_{mn} e_n$$

$$e_m = \sum_{n=1}^6 S_{mn} \sigma_n$$

4.3.1 Elastische Energiedichte

- Reduktion der Zahl der unabhängigen Koeffizienten von 36 auf 21

Ursache: elastische Energiedichte U ist quadratische Funktion der Dehnung

$$U = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^6 \sum_{n=1}^6 e_m \tilde{C}_{mn} e_n \longrightarrow \sigma_1 = \frac{\partial U}{\partial e_1} = \tilde{C}_{11} e_1 + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^6 (\tilde{C}_{1n} + \tilde{C}_{n1}) e_n$$

$$\sigma_2 = \frac{\partial U}{\partial e_2} = \tilde{C}_{22} e_2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1, n \neq 2}^6 (\tilde{C}_{2n} + \tilde{C}_{n2}) e_n$$

$$\sigma_3 = \dots$$

→ es gehen nur Kombinationen $C_{mn} = \frac{1}{2} (\tilde{C}_{mn} + \tilde{C}_{nm}) = C_{nm}$ ein

→ Elastizitätsmoduln bilden symmetrische Matrix mit **21 unabhängigen Koeffizienten**

4.3.2 Kristallsymmetrie und Elastizitätsmoduln

- weitere Reduktion der Zahl der unabhängige Koeffizienten aufgrund der Kristallsymmetrie (ohne Beweis)

Kristallsystem	Punktgruppe	elastische Konstanten
triklin	alle	21
monoklin	alle	13
orthorhombisch	alle	9
tetragonal	$C_4, C_{4h}, S_4,$ $C_{4v}, D_{4v}, D_{4h}, D_{2d}$	7 6
rhomboedrisch	$C_3, S_6,$ C_{3v}, D_3, D_{3d}	7 6
hexagonal	alle	5
kubisch	alle	3

- Elastizitätstensor von kubischen Kristallen

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

nur 3 unabhängige Komponenten C_{11}, C_{12}, C_{44}

Zusammenfassung: Teil 8, 26.11.2020/1

• Verhalten von Festkörpern unter Wirkung von äußerer Kraft (Kontinuumsmechanik)

- Beschränkung auf Bereich der **linearen Antwort** elastischer Bereich (reversibel, Hookescher Bereich)
- atomare Struktur wird vernachlässigt ($\lambda_{\text{Störung}} \gg \text{Atomabstand}$)

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} e_{kl}$$

$$\sigma = C \cdot e$$

Spannung (stress)

Elastizitätsmodul

Dehnung (strain)

sym. Tensor
2. Stufe

$$\sigma \equiv \frac{F}{A} = \frac{\text{Kraft}}{\text{Fläche}}$$

sym. Tensor
4. Stufe

$$e \equiv \frac{\Delta V}{V}$$

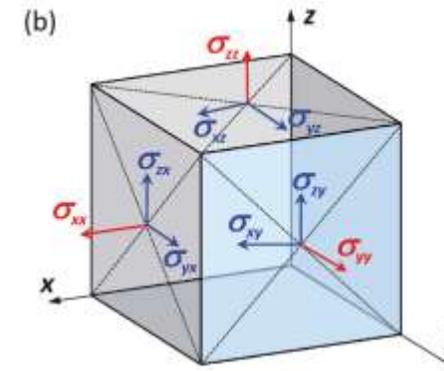
sym. Tensor
2. Stufe

• Spannung:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

→ **Normalspannung:** $\Delta F_n / \Delta A$

→ **Schub(Tangential-)spannung:** $\Delta F_{t1} / \Delta A$ und $\Delta F_{t2} / \Delta A$

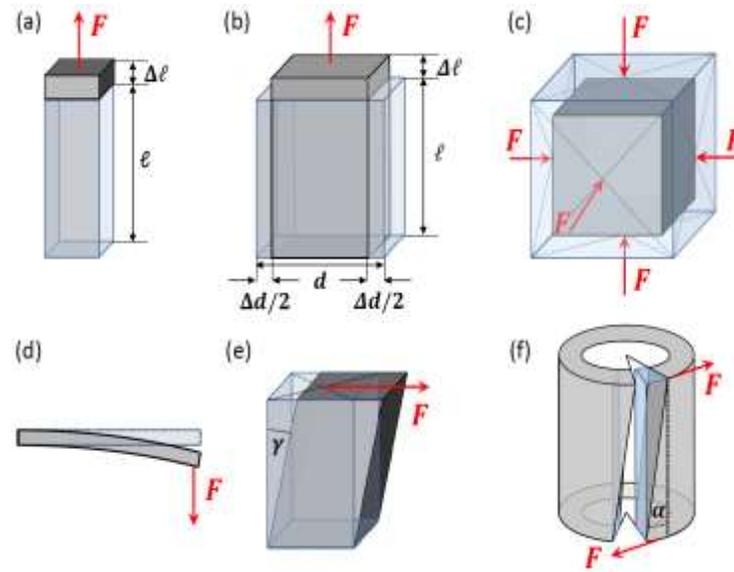


keine Translations- und Rotationsbewegung

$$\rightarrow \sigma_{ij} = \sigma_{ji}$$

symmetrischer Tensor 2. Stufe

• Belastungsfälle:



(a) – (c) Zug, Druck

Kraft wirkt normal und gleichmäßig

→ **Dehnung, Querdehnung, Volumenänderung**

(d) Biegung

Kraft wirkt ungleichmäßig

→ **ungleichmäßige Verformung**

(e) Scherung

Kraft wirkt tangential und gleichmäßig

→ **Scherung**

(f) Torsion

Kraft wirkt tangential, unterschiedliche Richtung

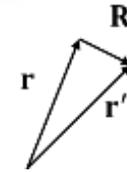
→ **Verdrillung**

Zusammenfassung: Teil 8, 26.11.2020/2

- **Dehnung:** Allgemeine Beschreibung mit Verschiebungsvektor

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{x}} + v(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{y}} + w(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$$



Taylorentwicklung:
$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \left(x \frac{\partial u}{\partial x} + y \frac{\partial u}{\partial y} + z \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(x \frac{\partial v}{\partial x} + y \frac{\partial v}{\partial y} + z \frac{\partial v}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{y}} + \left(x \frac{\partial w}{\partial x} + y \frac{\partial w}{\partial y} + z \frac{\partial w}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{z}} + \dots$$



$$\hat{\mathbf{e}} = \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{pmatrix}$$

$$e_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad e_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \dots$$

symmetrischer Tensor 2. Stufe

- **Elastizitäts- und Compliance-Tensor:**

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} e_{kl}$$

Dehnungskomponenten, bilden sym. Tensor 2. Stufe

$$e_{ij} = \sum_{kl} S_{ijkl} \sigma_{kl}$$

Spannungskomponenten, bilden sym. Tensor 2. Stufe

Elastizitätstensor (Elastizitätsmoduln)
81 Komponenten

Compliance-Tensor (elastische Konstanten)
81 Komponenten

Symmetriebeziehungen: $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ und $e_{kl} = e_{lk}$ sowie $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}$

→ **Reduktion auf 36 Komponenten**

- **Voigt-Notation:**

$$\begin{aligned} xx &\rightarrow 1, & yy &\rightarrow 2, & zz &\rightarrow 3, \\ yz = zy &\rightarrow 4, & xz = zx &\rightarrow 5, & xy = yx &\rightarrow 6 \end{aligned}$$

$$\sigma_m = \sum_{n=1}^6 C_{mn} e_n$$

Matrix-Notation

- **elastische Energiedichte**

elastische Energie = quadratische Funktion der Verformung

$$C_{mn} = C_{nm} \text{ (in Voigt-Notation) oder } C_{ijkl} = C_{klij} \text{ (in Tensor-Notation)}$$

→ **Reduktion von 36 auf 21 Komponenten**

→ **weitere Reduktion durch Kristallsymmetrie**

(nur noch 3 unabh. Komponenten für kubisches System)