



# **Physik der Kondensierten Materie 1**

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

**Vorlesungsstunde: 26.11.2020**

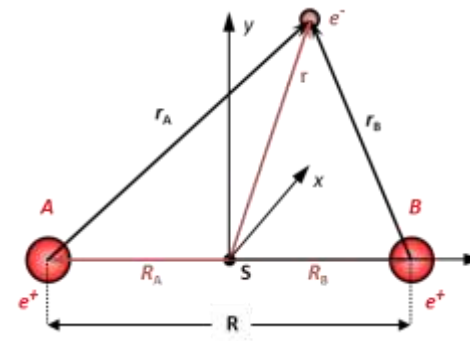
# Zusammenfassung: Teil 7, 24.11.2020/1

## • kovalente Bindung

- einfachstes Beispiel: **H<sub>2</sub><sup>+</sup>-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

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

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

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

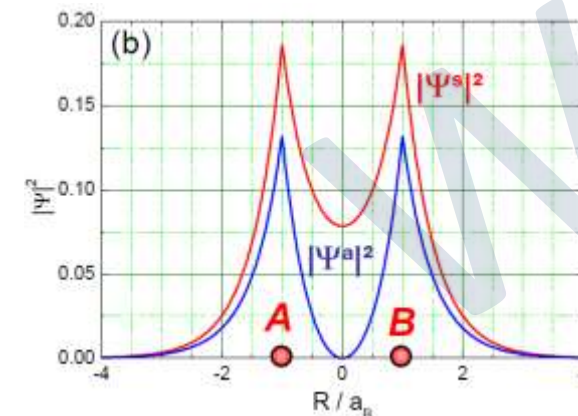
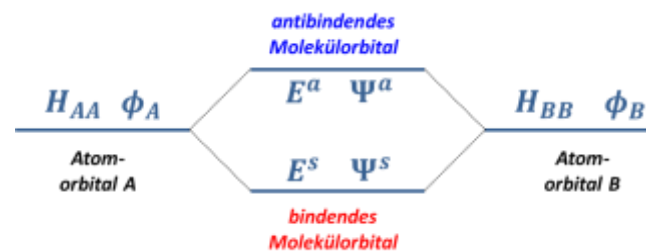
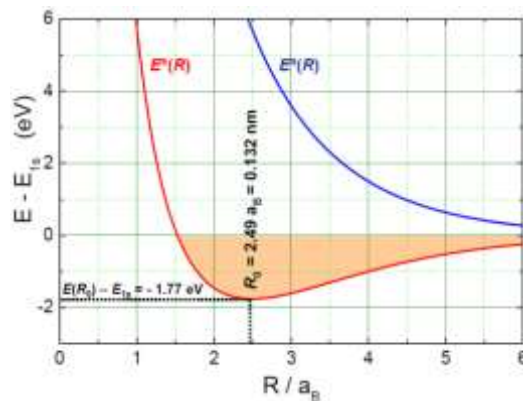
- Energiefunktionen

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

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

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**

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

- **H<sub>2</sub>-Molekül:**

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

- **Molekülorbitalnäherung:**

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

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

(mit antisymmetrischer Spin-Funktion)

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

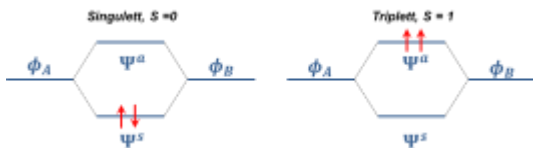
$\rightarrow$  vernachlässigt gleichzeitige Anwesenheit beider El. an einem Kern

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  $\rightarrow$

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



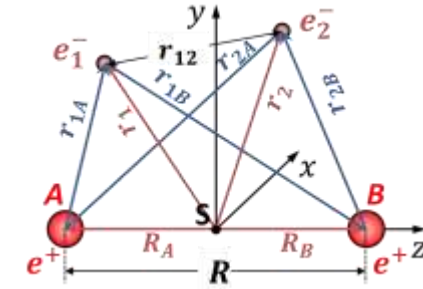
$$E^S(R) = 2E_{1s} + \frac{V + A}{1 + S}$$

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

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

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:

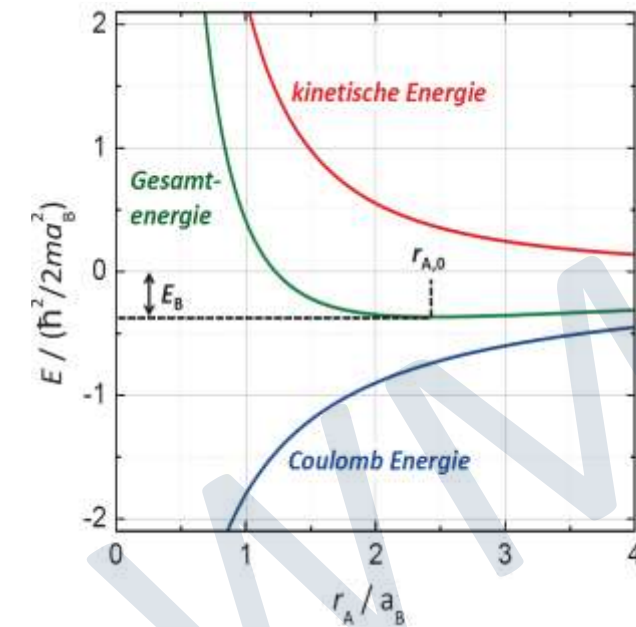
- **Austauschenergie**
- **Korrelationsenergie**
- **Benutzung von Pseudo-Potenzial**

## • 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

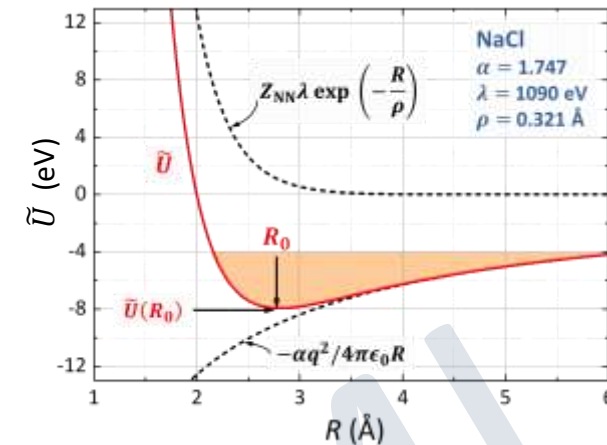
## • Atom- und Ionenradien

- 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  $c \simeq 10^3 - 10^4$  m/s
    - Wellenlänge  $\lambda > 100 \text{ Å}$  bzw.  $f = c/\lambda < 10^{11} - 10^{12}$  Hz
- Diskussion von Vorgängen auf atomarer Längenskala erfolgt später → **Kapitel 5 (Phononen)**



# 4 Elastische Eigenschaften

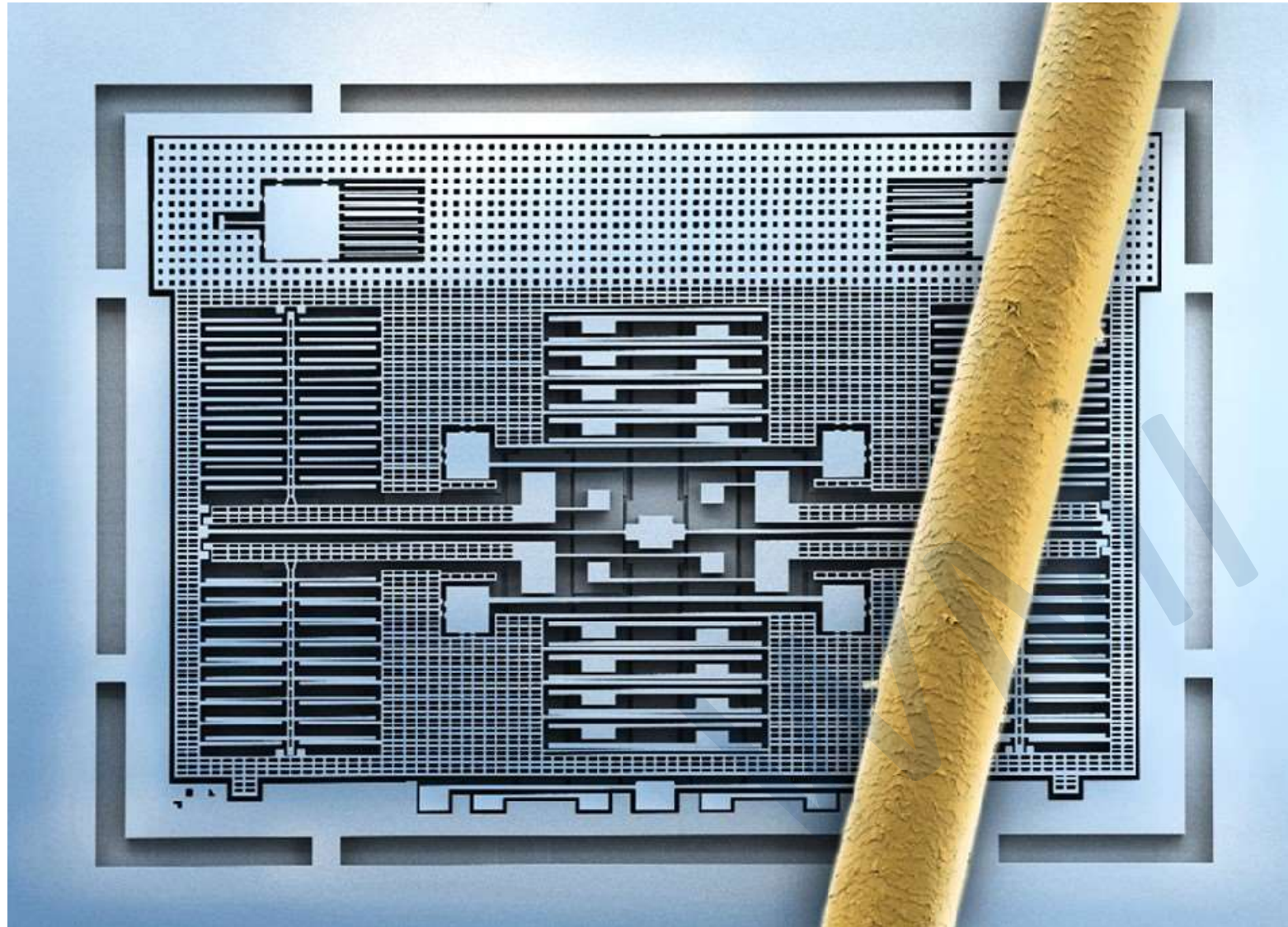
- große Bedeutung fürs Alltagsleben



# 4 Elastische Eigenschaften

- Bosch baut in Dresden Großfabrik für Autoelektronik

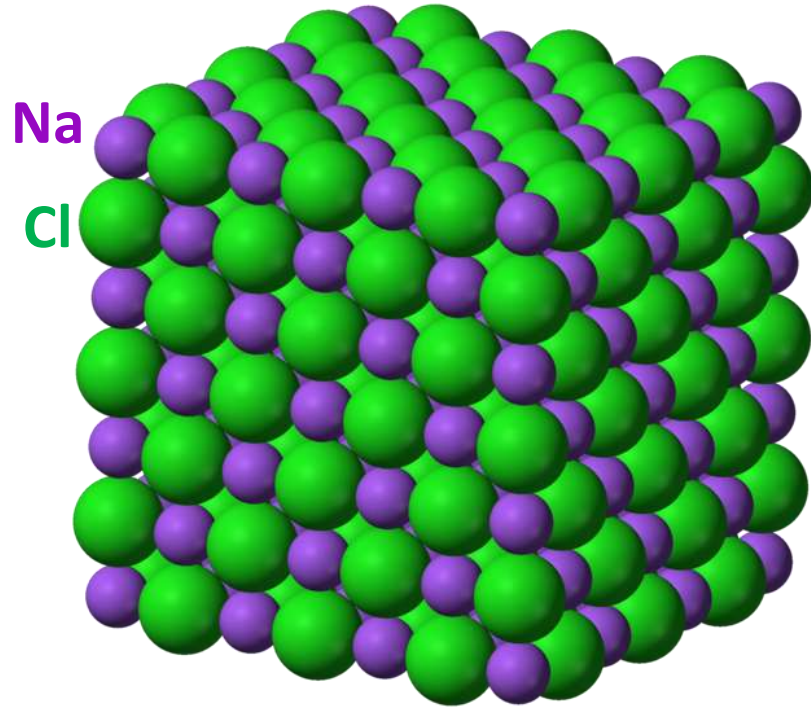
(veröffentlicht am 14. Juni 2017 )



***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

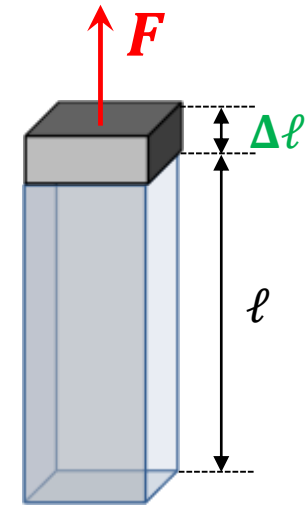
**Beispiel:** lineare Antwort auf mechanische Kraft  
(Hookescher Bereich)

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

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

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

$\gamma$  = Kontinuumseigenschaft (Materialkonstante)



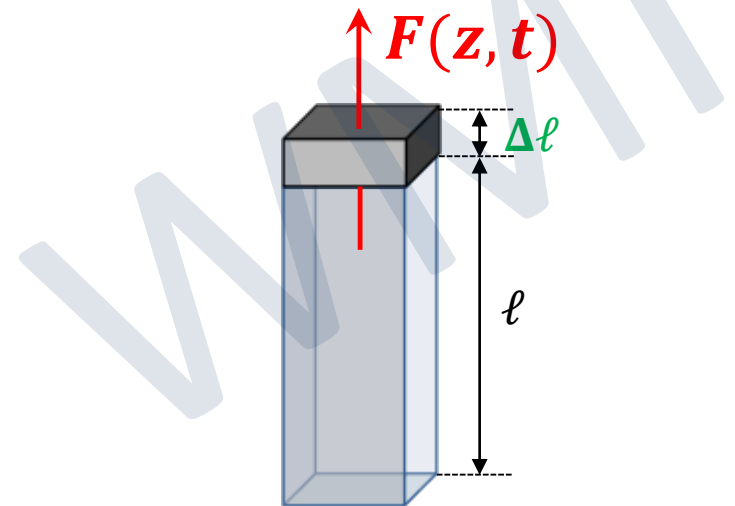
orts- und zeitabhängige Kraft:

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

Suszeptibilität

=

Empfindlichkeit auf Störung



# 4 Elastische Eigenschaften – lineare Antworttheorie

- Beispiele

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

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)

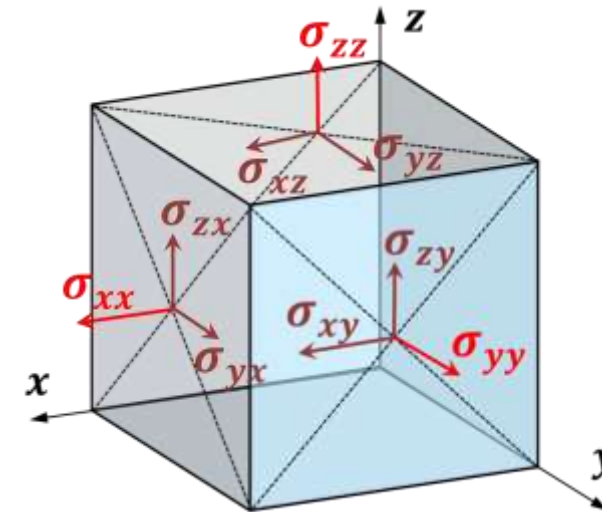
*Symmetrie des Festkörpers: Reduktion der unabhängigen Komponenten*

# 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

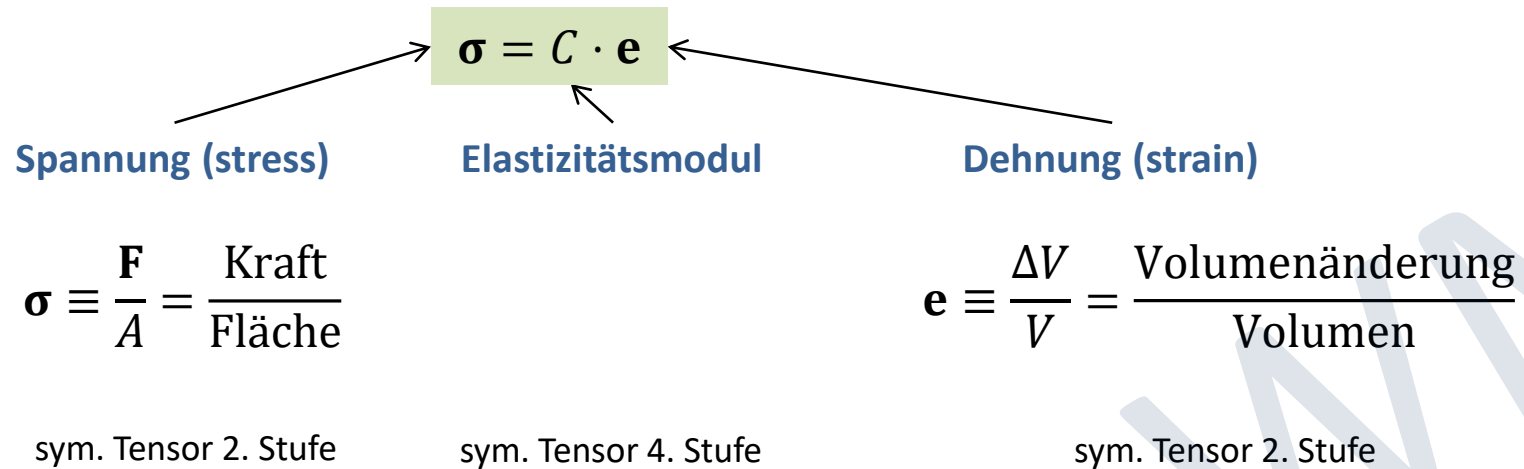
# 4.1 Elastische Eigenschaften – Grundlagen

- 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

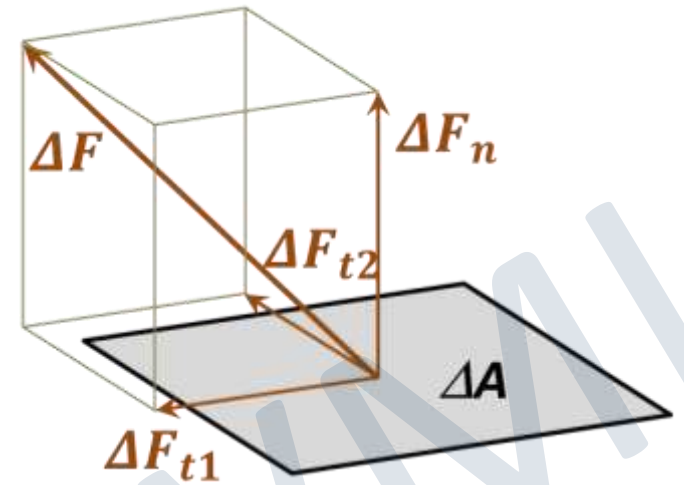
## 4.2.1 Der Spannungstensor

- **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

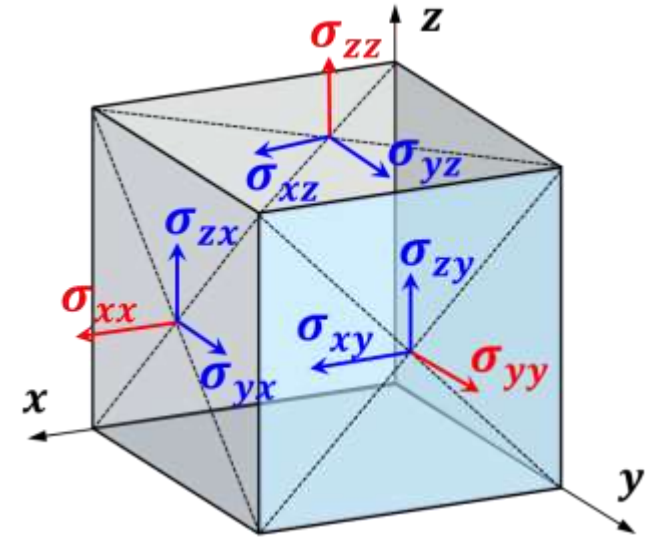
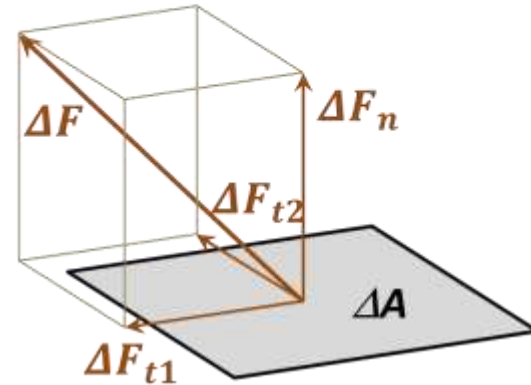
➔ **keine Translation:**

Spannungen auf entgegengesetzte Flächen gleich und mit umgekehrtem Vorzeichen

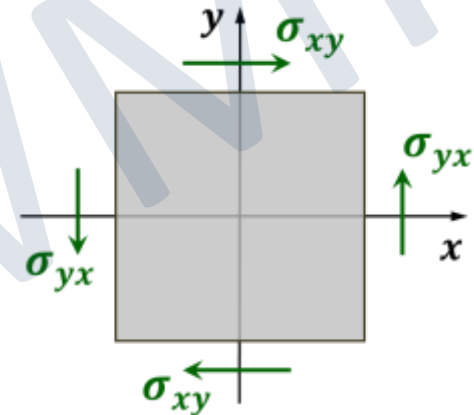
➔ **keine Rotation:**  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

➔ 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**

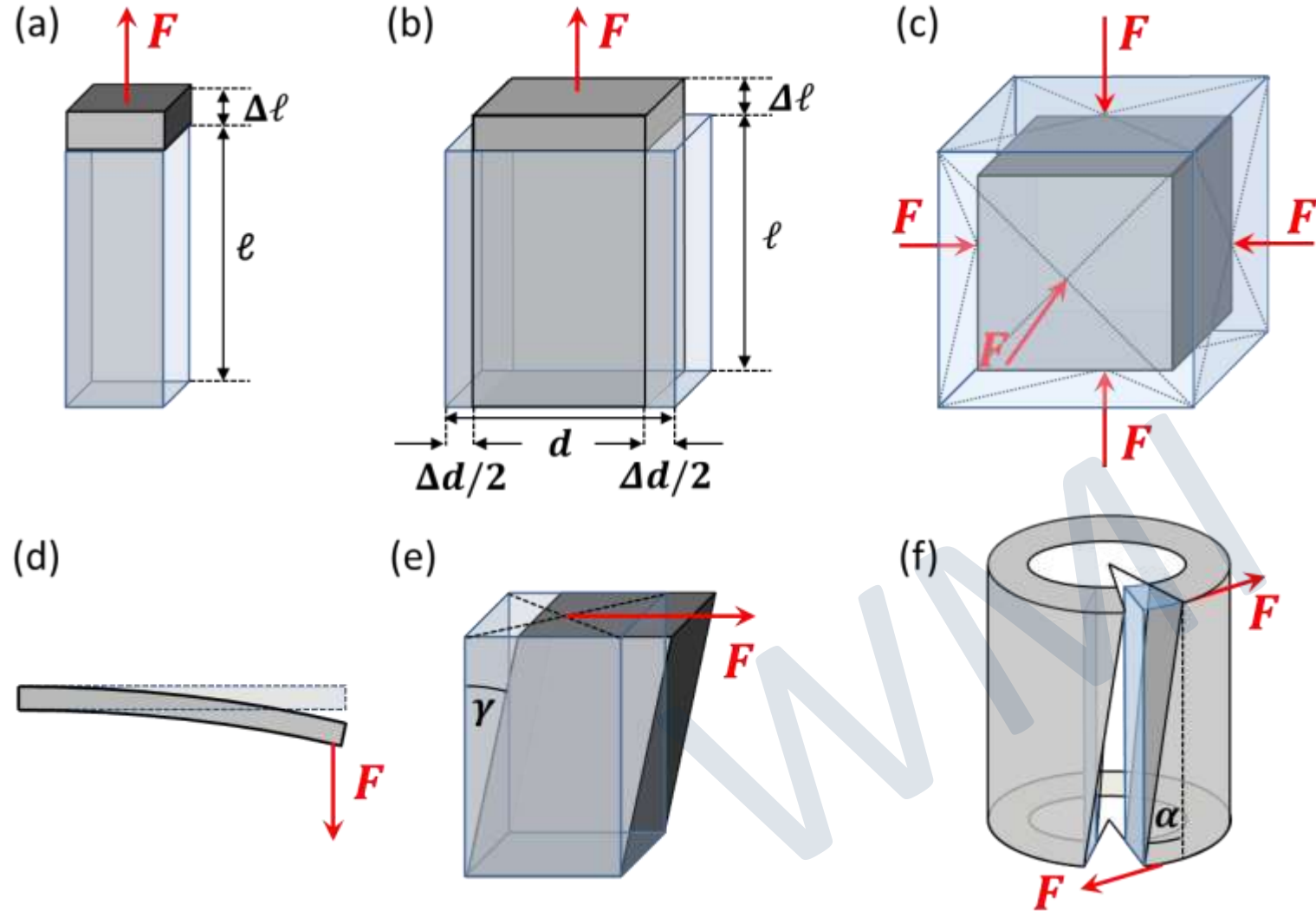
### Torsion:

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?

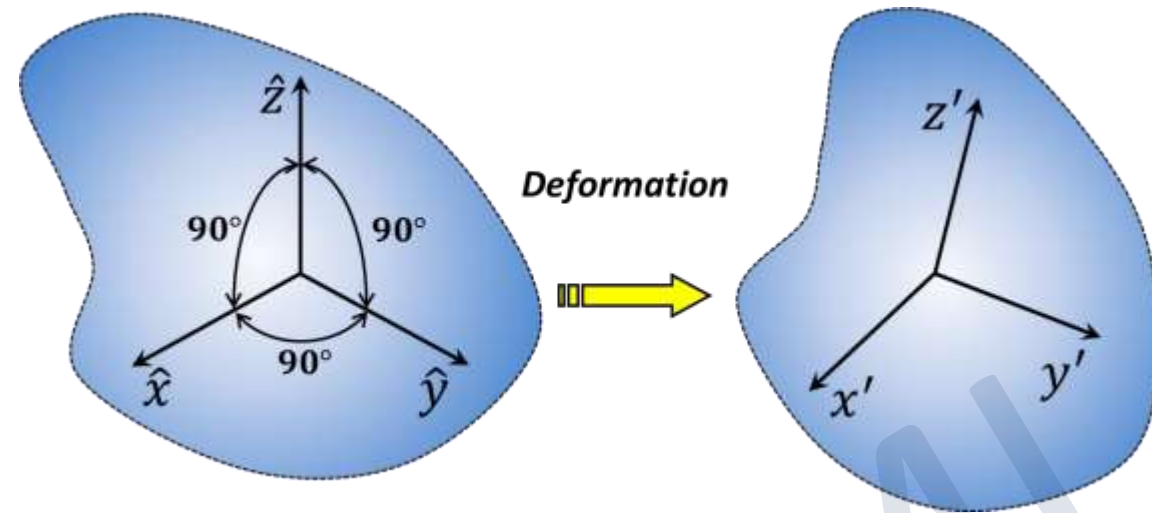
- wir betrachten dazu die gleichmäßige **Deformation eines orthogonalen Koordinatensystems**

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

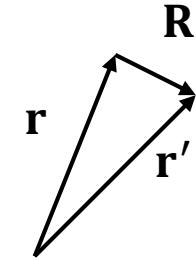
$$\mathbf{z}' \cdot \mathbf{z}' \simeq 1 + 2\epsilon_{zz} \Rightarrow z' \simeq 1 + \epsilon_{zz}$$

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

# 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  $x, y, z$

$$\begin{aligned}
 e_{xx} &= \frac{1}{2} \mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \\
 e_{yy} &= \frac{1}{2} \mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \\
 e_{zz} &= \frac{1}{2} \mathbf{z}' \cdot \mathbf{z}' - \frac{1}{2} = \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}
 \end{aligned}$$

(Längenänderung der neuen Koordinatenachsen)

$$\begin{aligned}
 e_{xy} &= \frac{1}{2} \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{yx} + \epsilon_{xy}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 e_{yz} &= \frac{1}{2} \mathbf{y}' \cdot \mathbf{z}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{zy} + \epsilon_{yz}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\
 e_{zx} &= \frac{1}{2} \mathbf{z}' \cdot \mathbf{x}' = \frac{1}{2} (\epsilon_{zx} + \epsilon_{xz}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)
 \end{aligned}$$

(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  $\delta$  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)

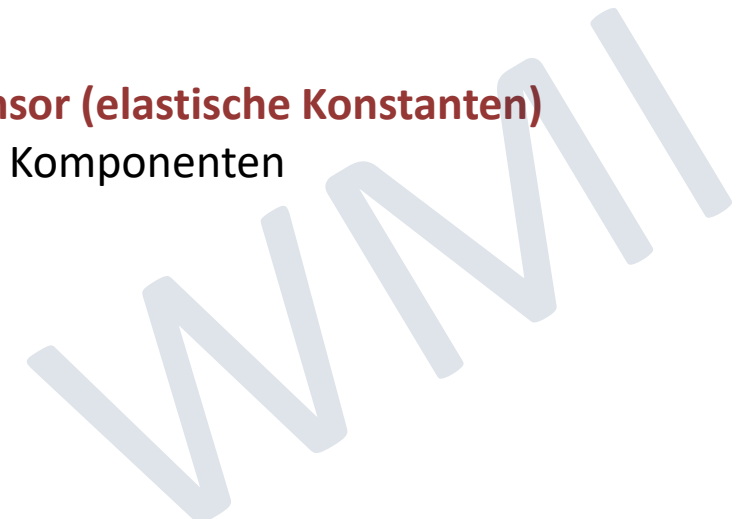
81 Komponenten

- 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 unabhängigen 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

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

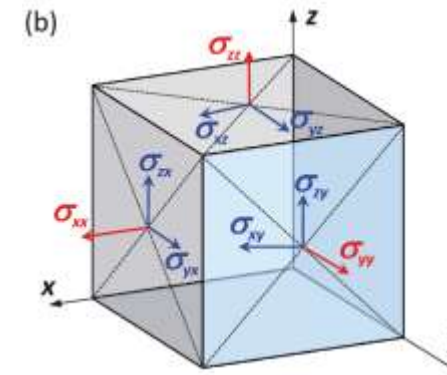
sym. Tensor  
2. Stufe

## • 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  $\Delta F_{t2} / \Delta A$

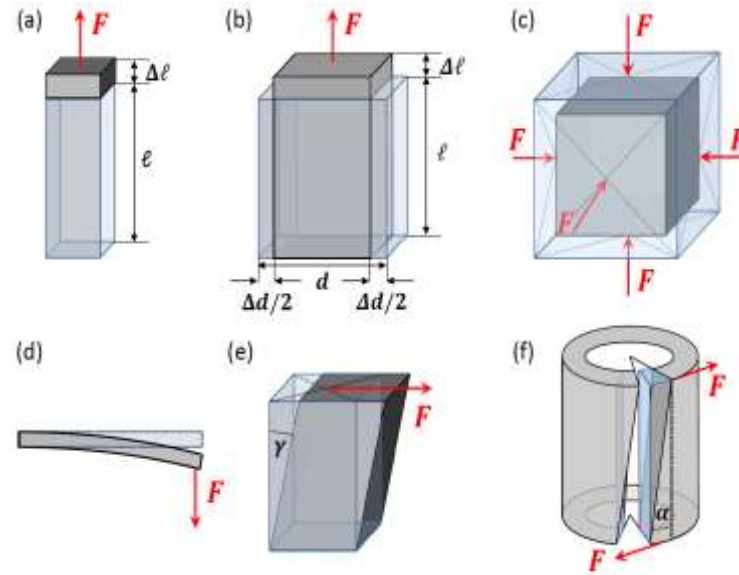


keine Translations- und Rotationsbewegung

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

**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

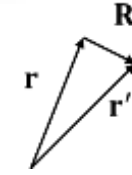
→ **Verdrillung**

# 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)