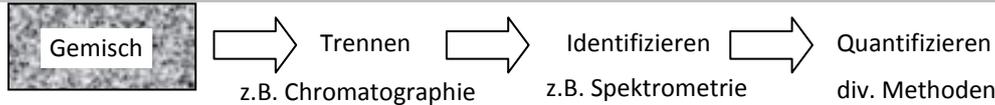


WERKSTOFFE: STRUKTUR & EIGENSCHAFTEN

Instrumentalanalytik

Analysenschritte

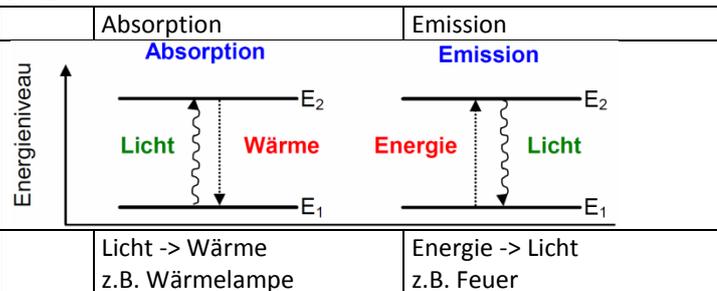


Spektrometrie - Identifizieren

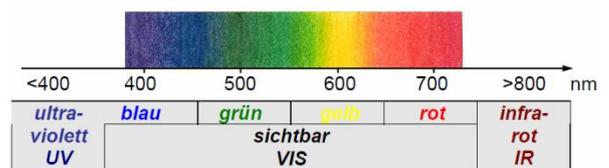
$E = h \cdot \nu$ $E = h \cdot c \cdot \frac{1}{\lambda}$	E	Energie	[J]
	h	Planck'sches Wirkungsquantum	$6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
	ν	Frequenz	[Hz]
	c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
	λ	Wellenlänge	nm, bzw m

Energie der Strahlung							
Wellenlänge	$1 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^1$	nm
Frequenz	$3 \cdot 10^8$	$3 \cdot 10^{12}$	$3 \cdot 10^{13}$	$3 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{16}$	Hz
Spektralbereich	Radiowellen	Mikrowellen	Infrarot	VIS	Ultraviolett	Röntgen	
Anregungsfähiges System	 Spinänderung von Atomkernen	 Molekülrotationen	 Molekülschwingungen	 Valenzelektronen Elektronenanregung	 Anregung von Rumpfelektronen		
Methode	NMR	Mikrowellen	IR	UVVIS	Röntgenfluoreszenz		

Prozesse



Aufspaltung des weissen Lichtes



Lambert-Beer

$T = \frac{l}{l_0} \cdot 100$ $E(\lambda) = -\log T = \varepsilon(\lambda) \cdot c \cdot d$	T	Transmission	%
	l, l_0	Lichtstärken bei λ	
	$\varepsilon(\lambda)$	Extinktionskoeffizient bei λ	$\frac{l}{\text{mol} \cdot \text{cm}}$
	c	Konzentration	$\frac{\text{mol}}{l}$
	d	Proben-Schichtdicke	cm

Methoden

Röntgenfluoreszenz-analyse	RFA	<u>Emission:</u> Anregung der Rumpfelektronen durch Röntgenquelle	- zerstörungsfrei - Elemente an Na - Messbereich: 0.01-100%
Atomabsorptions-spektrometrie	AAS	<u>Absorption:</u> Anregung von Valenzelektronen der Atome	- nicht zerstörungsfrei - Messung von z.B. zerstäubter Lösung in Flamme - fast alle Elemente messbar - Messbereich <0.1%
UV/VIS-Spektrometrie	UV/VIS	<u>Absorption:</u> Anregung der Elektronen in Bindung von Molekülen	- VIS: Farb-Charakterisierung (Komplementärfarbe wird absorbiert) - UV: Erkennen von Aromaten, C=O, C=C
Infrarot-Spektrometrie	IR	<u>Absorption:</u> Anregung von Schwingungen zw. Atom-/Molekülgruppen	- Molekül-Charakterisierung: Gruppen-/Fingerprintfrequenzbereich - Quantifizierung mit Lambert-Beer
Kernresonanz-Spektrometrie	NMR	Spezial: Resonanz in magnetischen Feldern	- Molekülstruktur-Charakterisierung
Massen-Spektrometrie	MS	Spezial: Ionisierung / Ionen-ablenkung in el./magn. Feldern	- Molekülstruktur-Charakterisierung

Chromatographie - Trennen

Eine erfolgreiche Trennung eines Stoffgemisches wird dann erreicht, wenn die Komponenten stationäre-/mobile Phase und Stoffgemisch/Detektion gut aufeinander abgestimmt sind.

Prozesse

Adsorption	Anbindung von Stoffen auf freien Materialoberflächen auf Basis von zwischenmolekularen Wechselwirkungen	Aktivkohle, Kieselgel, Aluminiumoxid
Verteilung	Einstellung eines Verteilungsgleichgewicht eines Stoffes zwischen zwei wenig/nicht mischbaren, unterschiedlichen polaren, flüssigen Phasen	Wasser und Hexan

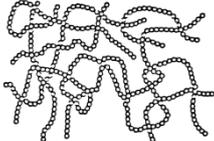
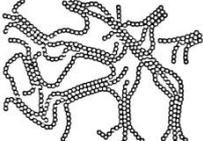
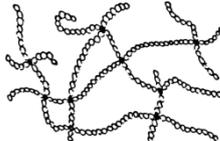
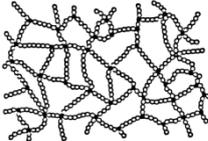
Methoden

Dünnschicht-Chromatographie	DC	<u>Adsorption:</u> infolge Kapillarwirkung	- mobile Phase: tendenziell unpolar - höhermolekulare, nicht flüchtige Stoffe - billig, Nachweisgrenze bis < 1µg
High-Performance-Liquid-Chromatography	HPLC	<u>Adsorption/Verteilung:</u> Veränderung der Polarität, der mobilen Phase	- hohe Trennleistung, hohe Empfindlichkeit - höhermolekulare, nicht flüchtige Stoffe - teuer, für temperaturempfindliche Stoffe
Gaschromatographie	GC	<u>Adsorption/Verteilung:</u> durch Kapillarsäule	- hohe Trennleistung - niedermolekulare, leichtflüchtige Gase

Organische Werkstoffe

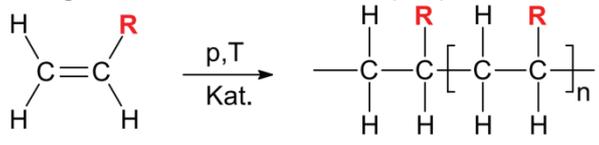
Definition	Vorteile	Nachteile
Organische Werkstoffe (C,H,N,O,F,Si,S,Cl) Makromoleküle (und Additiven)	niedrige Dichte unterschiedliches Design Flexibilität, Schlagfestigkeit, Transparenz elektrisch und thermisch isolierend	niedrige thermische Beständigkeit meist brennbar schlechter Abbau-Mechanismus

Einteilung

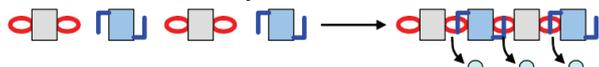
Thermoplaste		Elastomere	Duromere
nur zwischenmolekulare Kräfte plastisch verformbar (T wird grösser) reversibel schmelzbar, einfrierbar		kovalente Bindungen nicht thermisch bearbeitbar	
amorph verzweigt	teilkristallin linear	reagieren elastisch schwach vernetzt	kaum Plastizität → spröde stark vernetzt
			

Herstellverfahren

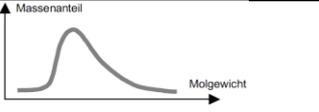
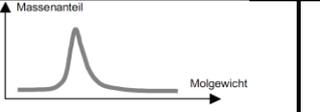
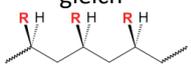
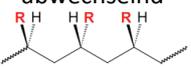
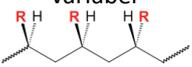
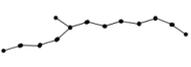
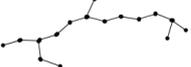
Additionspolymerisation

<p>Polymerisation Bildung von C-C-Ketten aus Alkenen (C=C)</p>  <p>PTFE (Teflon): hohe Beständigkeit gegen Chemikalien, UV, Wärme da hohe Bindungsenergien und räumlicher Schutz durch F</p>	PE	Polyethylen	R: H
	PP	Polypropylen	R: CH ₃
	PS	Polystyrol	R: -C ₆ H ₅ (Aromat)
	PVC	Polyvinylchlorid	R: Cl
	PVAc	Polyvinylacetat	(Ester)
	PMMA	Polymethylmetacrylat	R: CH ₃ : Ester
	PTFE	Polytetrafluorethylen	4xR: F
<p>Polyaddition heteroatomhaltigen Kette (mit O und N) aus Monomer</p> 	PA6	Polyamid 6	
	POM	Polyoxymethylen (aus Formaldehyd)	
	PU	Polyurethan	
<p>Stufenreaktion mit 2 Monomeren, mit je mindestens 2 reaktiven Stellen</p> 			

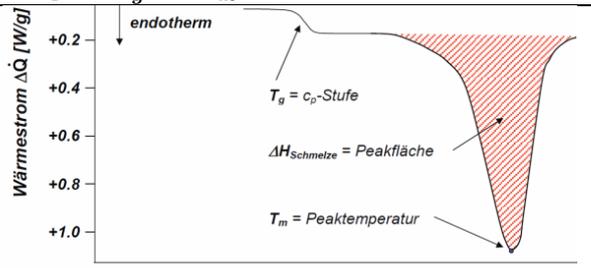
Kondensationspolymerisation

<p>Polykondensation Abspaltung eines niedermolekularen Stoffes (z.B. Wasser) mit 2 Monomeren, mit je mindestens 2 reaktiven Stellen</p> 	PA66	Polyamid 66 (Nylon)	
	PET	Polyethylenterephthalat	
		Polydimethylsiloxan (Silikon)	

Struktur & Eigenschaften

Molekulargewichtsverteilung		Taktizität		
breit	schmal	isotaktisch	syndiotaktisch	ataktisch
 erleichterte Verarbeitung		gleich  hohe T _{Schmelze} hohe Kristallinität	abwechselnd 	variabel  tiefe T _{Schmelze} tiefe Kristallinität
Molekülgestalt (Kristallinität)		Verzweigungen		
regelmässiger Kettenaufbau	nimmt zu	linear	quasi-linear	verzweigt
eingeschr. Beweglichkeit	nimmt ab			
Störstellen durch andere Monomere	nimmt ab			

Thermische Kennwerte

Phasenübergänge		Messung von T_g und T_m mit DSC	
T _g	Glasübergangstemp. → Änderung von c _p	alles starr	
T _m	Kristallitschmelzetemp. → endoth. Phasenumw.	amorphe sind beweglich, kristalline unbeeinflusst	
T _f	Fliesstemp. amorpher KS	alles beweglich, fliessfähig	
T _z	Zersetzungstemp.	Abbau von HCl	

Verarbeitung von Thermoplasten

primäre Verarbeitung (T > T_f)		sekundäre Verarbeitung (T_g < T < T_f)		
Extrusion	Spritzguss	Blasformen	Thermoformen	Folienblasen
Endlosware, ab 0.5mm	Einzelteile	Flaschen	Tiefgezogene Behälter	Folien, unter 0.5mm

Kleben

Klebeverbindung

Fügeteil 1	
Klebstoff	
Fügeteil 2	
Relevante Faktoren	
<ul style="list-style-type: none"> • Fügeteiloberfläche • Klebstoff • Geometrie • Beanspruchung / Langzeitverhalten 	

Faktor Fügeteiloberfläche

Kontaktwinkel bzw. Oberflächenspannung

	K	Klebstoff
	F	Fügeteil
	G	Gasatmosphäre
	α	Benetzungswinkel
	σ_{KG}	Oberflächenspannung K/G
	σ_{FG}	Oberflächenspannung F/G
	γ_{KF}	Oberflächenspannung K/F

gute Benetzung

- kleiner Kontaktwinkel => hohe Polarität der Oberfläche => hohes σ_{FG}
- $\sigma_{FG} > \sigma_{KG}$
- σ von F muss mindestens gleich gross sein wie σ von ausgehärtetem K

Youngs Gleichung

$$\cos \alpha = \frac{\sigma_{FG} - \gamma_{KF}}{\sigma_{KG}}$$

Oberflächen-Vorbehandlungen

chemische Vorbehandlung (Einbau polarer Gruppen an der Oberfläche)

fluorierte Polymere (PTFE)	von 18 auf $\sigma_{FG} = 50 \frac{mN}{m}$	Ätzen mit Natriumverbindungen	Bildung von C=C-Bindungen
Polyolefine (PE, PP, PB)	von 30 auf $\sigma_{FG} = 40 \frac{mN}{m}$	Chromsäure-Ätzung	Bildung von -OH, -C=O, -COOH
		Beflammen	Bildung von -OH, -C=O
		Corona- und Plasma-Behandlung	Bildung von Radikalen

physikalische Vorbehandlung

- Entfernen von Verunreinigungen (Lösungsmittel oder Laugen)

Kräfte

Benetzung über zwischenmolekulare Kräfte

Ausbildung von kovalenten Bindungen

Mechanische Verankerung (bedingt ausreichende Fließbarkeit)

-> Erhöhung der Rauheit durch: Mechanisch: schleifen, bürsten, sandstrahlen, Chemisch: Ätzen

Topfzeit

Zeitspanne, in welcher ein Klebstoff nach dem Mischen für eine bestimmte Verwendung brauchbar ist.

Faktor Klebstoff

Anaerobe Acrylate	Sauerstoff hemmt unter Luftausschluss wirkende radikalische Polymerisation	kleiner Klebespalt Gewindesicherung, Rohrverb.
Cyanacrylate (Sekundenkleber)	anionische Polymerisation	dünne Klebschicht (0.2mm)
Epoxide	Ringöffnungsreaktionen	universell, hohe Scherfestigkeit

Faktor Beanspruchung

Zug, Scherung, Schälung (Adhäsionsbruch, Kohäsionsbruch), Torsion

Faktor Geometrie

Ausreichende Klebefläche

Vermeidung von Spannungsspitzen

Einführung in die Werkstoffkunde

Definition

Werkstoffe sind in der Regel Festkörper, sie sind das Ausgangsmaterial für Werkzeuge und Bauteile

Werkstoffwahl

- Rohstoff muss verfügbar und relativ leicht bearbeitbar sein
- Herstellungsprozess muss bekannt sein
- kennt und nutzt bestimmte Eigenschaften
- Kosten/Nutzen-Verhältnis

Einteilung

Metalle und Legierungen	Keramik und Glas	Polymere	Verbundwerkstoffe (Composite)	Schäume
metallische Bindung freie Elektronen härtbar, hohe Dichte duktil (formbar) hart, fest, schwer reflektieren Strahlung	kovalente-/Ionen-Bindungen temperaturbeständig Magnesium + Nichtmetall hart, spröde Aluminiumoxid nichtleitend	kovalente-/V.d.W.-Bindungen leicht, günstig, farbig gut verformbar nicht leitend	Kombination Faser-/Teilchenverbund gut belastbar anisotrop (richtungsabhängig)	Kombination mit Gasen offenporig/ geschlossenporig

Hochtemperatur-Werkstoffe	
Halbleiter (z.B. Silizium)	elektrische und optische Eigenschaften, durch dotieren
Sensor- und Aktor-Werkstoffe	Wandler-Eigenschaften
Biomaterialien	in biologischen Systemen keine abstossende Reaktionen (bio-kompatibel)
Advanced Materials	Hochleistungswerkstoffe, optimiert

Reinheit

Struktur

Größen

$6N = 99.9999\%$	Makrostruktur ($> 1mm$) Mikrostruktur ($1\mu m \dots 1mm$) Nanostruktur ($1nm \dots 1\mu m$)	$1 \frac{N}{mm^2} = 1MPa$	$1 \frac{kg}{dm^3} = 1 \frac{g}{cm^3}$
------------------	--	---------------------------	--

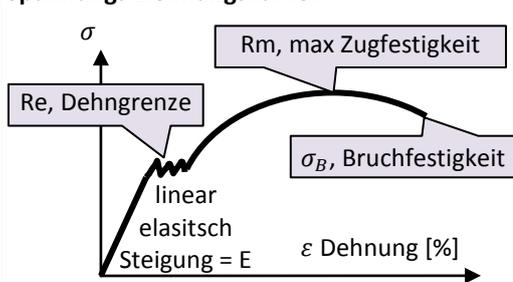
Eigenschaften von Ingenieurwerkstoffen

Eigenschaften

mechanische Volumeneigenschaft	nicht-mechanische Volumeneigenschaft	Oberflächeneigenschaften
Zugfestigkeit, Druck, Biegung, Torsion, Scherung, Härte, Steifigkeit, Elastizität, Verformbarkeit, Sprödigkeit	elektr., therm. Leitfähigkeit, Schmelzpunkt Transparenz + Reflexionsvermögen + Absorption = 100%	Rauheit, Korrosionsbeständigkeit, Abriebfestigkeit, Oberflächenspannung

Mechanische Eigenschaften

Spannungs-Dehnungskurven



$$\sigma = E * \epsilon = \frac{F}{A}$$

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0}$$

$\sigma \left[\frac{N}{mm^2} \right]$	Zugfestigkeit
E	E-Modul
$\epsilon [\dots]$	Dehnung

- **Keramiken** halten hohe Drücke aus, müssen aber vor Zugbelastungen geschützt werden
- **Metalle** haben eine grosse Steigung
- harte Materialien (grosses E) haben hohen Schmelzpunkt
- Durch elastische Verformung wird Energie gespeichert

Thermische Eigenschaften

<ul style="list-style-type: none"> • E-Modul, Festigkeit sind temperaturabhängig • Wärmeleitfähigkeit: Schnelligkeit, mit der Wärme weitergeleitet wird • Temperaturleitfähigkeit: Schnelligkeit, mit der sich ein Gegenstand aufheizen/abkühlen lässt 	$\Delta T = \alpha * \frac{\Delta l}{l_0}$	α	Wärmeausdehnungskoeffizient
	$\frac{\Delta T}{\Delta x} * \lambda = -q$	λ	Wärmeleitfähigkeit
	$a = \frac{\lambda}{\rho * C_p}$	$q \left[\frac{W}{m^2} \right]$	Wärmestrom
		$C_p \left[\frac{J}{kg * K} \right]$	spezifische Wärme
		a	Temperaturleitfähigkeit

Elektrische Eigenschaften

$\rho_e = \frac{A}{L} * R$	ρ_e	spezifischer elektrischer Widerstand	$[p] = \Omega m$
$\sigma = \frac{1}{\rho_e}$	σ	elektrische Leitfähigkeit	$[\sigma] = \frac{1}{\Omega m}$
$C = \epsilon \left(\frac{A}{t} \right)$	C	Kapazität	
	ϵ	Permittivität („Durchlässigkeit“)	

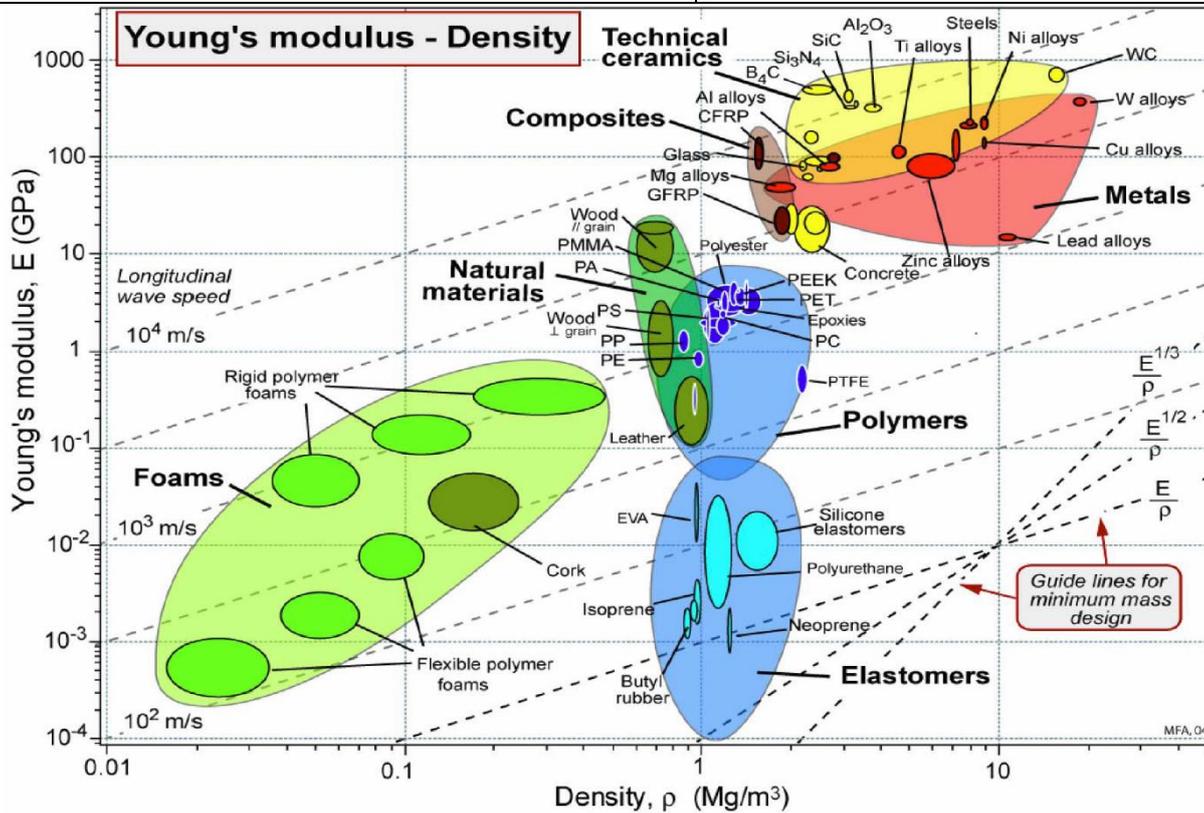
nur elektrisch nichtleitende Stoffe besitzen eine Dielektrizitätskonstante

Produktanforderungen und passende Werkstoffe

Allgemein <ul style="list-style-type: none"> E-Modul ist eine richtungsabhängige Grösse ab 40% der Schmelztemperatur beginnt das „Kriechen“ 	Bindungskräfte $F = \frac{dU}{dr}$		F Kraft um 2 Atome voneinander zu bringen																								
	$S = \frac{dF}{dr} = \frac{d^2U}{dr^2}$		U inneratomaren Potentials																								
E-Modul abhängig von <ul style="list-style-type: none"> Abstand der Atome (viele Bindungen) Festigkeit der Einzelbindung Vernetzungsgrad 	$E = \frac{S_0}{r_0}$		S Steifigkeit																								
	Atompackung 1. Ordnungszahl 2. Packungsdichte 3. Frage ob Luft		S₀ elastische Beziehung																								
Bindungstyp <table border="1"> <thead> <tr> <th>Bindungstyp</th> <th></th> <th>S₀ (N/m) *</th> <th>E (GPa)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>kovalent</td> <td>(C-C)</td> <td>50 ... 180</td> <td>200 ... 1000</td> </tr> <tr> <td>metallisch</td> <td>(Cu-Cu)</td> <td>15 ... 75</td> <td>60 ... 300</td> </tr> <tr> <td>ionisch</td> <td>(Na-Cl)</td> <td>8 ... 24</td> <td>32 ... 96</td> </tr> <tr> <td>H-Bindung</td> <td>(H₂O-H₂O)</td> <td>2 ... 3</td> <td>8 ... 12</td> </tr> <tr> <td>van der Waals</td> <td>(Polymere)</td> <td>0,5 ... 1</td> <td>2 ... 4</td> </tr> </tbody> </table>			Bindungstyp		S ₀ (N/m) *	E (GPa)	kovalent	(C-C)	50 ... 180	200 ... 1000	metallisch	(Cu-Cu)	15 ... 75	60 ... 300	ionisch	(Na-Cl)	8 ... 24	32 ... 96	H-Bindung	(H ₂ O-H ₂ O)	2 ... 3	8 ... 12	van der Waals	(Polymere)	0,5 ... 1	2 ... 4	
Bindungstyp		S ₀ (N/m) *	E (GPa)																								
kovalent	(C-C)	50 ... 180	200 ... 1000																								
metallisch	(Cu-Cu)	15 ... 75	60 ... 300																								
ionisch	(Na-Cl)	8 ... 24	32 ... 96																								
H-Bindung	(H ₂ O-H ₂ O)	2 ... 3	8 ... 12																								
van der Waals	(Polymere)	0,5 ... 1	2 ... 4																								

Ashy Diagramm

Schallgeschwindigkeit in einem Festkörper	$v = \left(\frac{E}{\rho}\right)^{1/2}$
Materialindex	M



Die Struktur als wesentliche Werkstoffinformation

Kristall

dreidimensional-periodische Anordnung (mit Fernordnung)
 optimal 90° Winkel, kleiner Umfang (->Quadrat)
 Niedersymmetrische Materialien sind Sensormaterialien

Symmetrie Matrix

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{21} & S_{31} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Elementarzelle

Anzahl Atome

Ecke = $\frac{1}{8}$ Atom
 Kante = $\frac{1}{4}$ Atom
 Fläche = $\frac{1}{2}$ Atom
 Raum = 1 Atom

$$\text{Zähligkeit} = \frac{360^\circ}{\text{Drehwinkel}}$$

Millier Indizes

$\bar{1} = -1$
 reziprok-Wert nehmen:
 nie Brüche

$$(m \ n \ p) \rightarrow \left(\frac{f}{m} \ \frac{f}{n} \ \frac{f}{p} \right)$$

$$\left(1 \ 2 \ \frac{1}{3} \right) \rightarrow \left(2 \ 1 \ 6 \right)$$

parallel verschiebbar

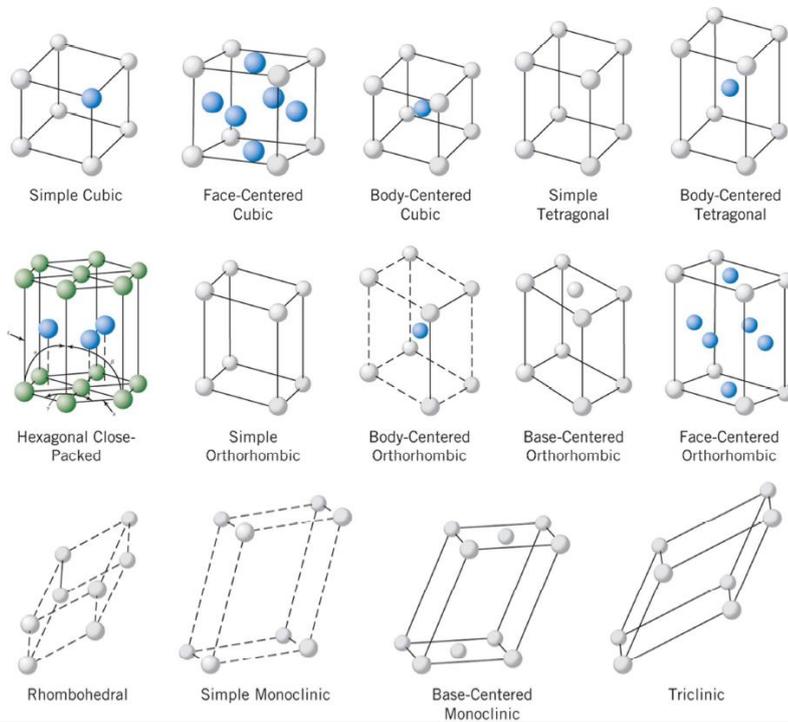
Richtung: []

äquiv. Richtung: < >

Einzelne Ebene: {hkl}

Symmetrische Ebene: {hkl}

14 Bravais Gitter



Winkelberechnung im kubischen Kristallsystem

$$\begin{pmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{vmatrix} * \cos \delta$$

Dichte

$$\rho = \frac{n * A}{V_c * N_A}$$

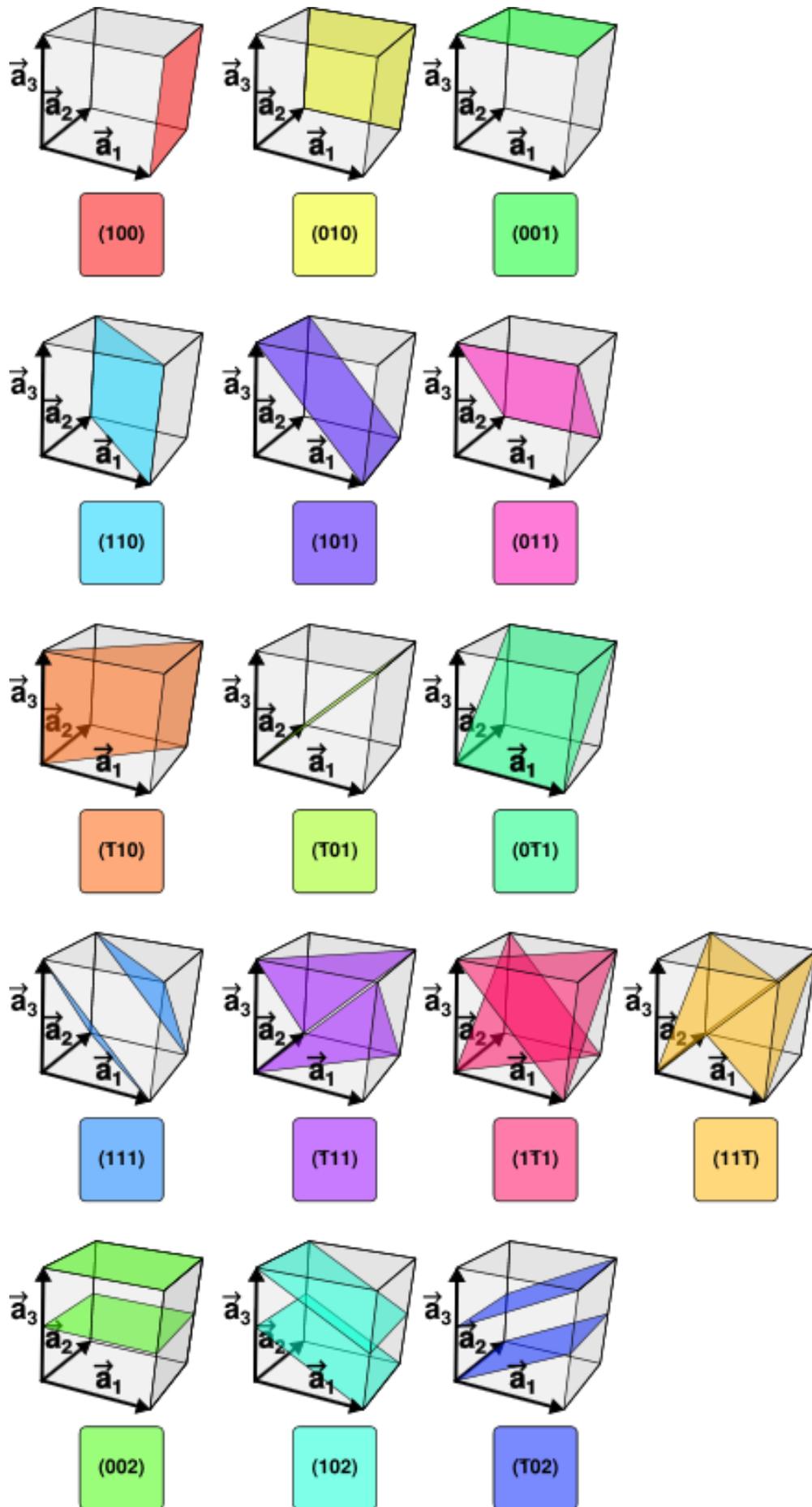
n	Anzahl Atome in der Zelle
A	Atomgewicht $\left[\frac{g}{mol} \right]$
V_c	Volumen der Einheitszelle
N_A	Avogadro Zahl $\left[6.022 \times 10^{23} \frac{Atome}{mol} \right]$

Nah- und Fernordnung

Nahordnung: Koordination, Koordinationszahl (nächste Nachbarn)
Fernordnung: regelmässig: Kristall
 unregelmässig: amorph

Strukturtypen

kfz = fcc	krz = bcc	kp = cp	hdp = hcp
Kupfer	Eisen	Polonium	Magnesium



Quelle: wikipedia.org