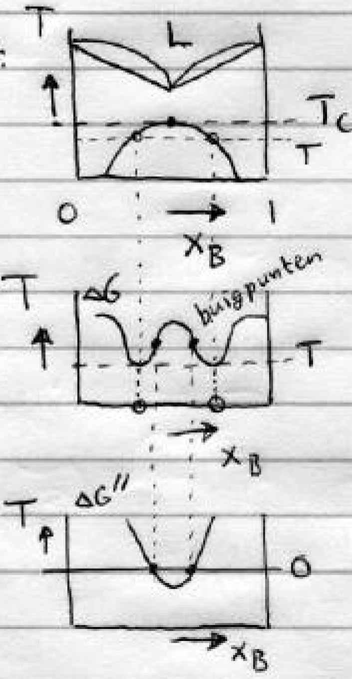
SOEPERTENTAMEN

- Binaire A-B legering, faseschieding in vaste fase

Q: Hoe hangt kritieke T (T_c) af van interactie energieën tussen A en B

A:



$$\Delta G = x_A x_B \Omega + kT\left[x_A \ln x_A + x_B \ln x_B\right]$$

$$x_A + x_B = 1$$

$$\Delta G' = (1 - 2x_B)\Omega + kT\left(-\ln(1 - x_B) + \ln x_B\right)$$

$$\Delta G'' = -2\Omega + \frac{kT}{x_B x_A} = 0$$

$$T_c = \frac{2\Omega x_A x_B}{k}$$

Eis: $\Delta G'' = \Delta G' = 0$
als $T = T_c$

Q: Fysische aannames / veronderstellingen

A: 1) $\Delta S_{excess} = 0 \Rightarrow \Delta S = \Delta S^{ideal} = -k\left[x_A \ln x_A + x_B \ln x_B\right]$

2) alleen naaste nabuur interactie (reguliere benadering)
$(A-A) + (B-B) = 2(A-B)$ (bindingen)

SOEPERTENTAMEN

- Vacatureconcentratie in thermisch evenwicht

Q: Hoe hangt de vacatureconcentratie in thermisch evenwicht af van de formatie energie en entropie?

A: $\Delta G_n = \Delta H - T\Delta S$

Thermisch evenwicht: $\frac{\partial \Delta G_n}{\partial n} \to 0$

$\Delta H = n \Delta H_f^{(vac)}$

$\Delta S = n \Delta S_{vib}^{(vac)} + \Delta S_{config}$

$= n \Delta S_{vib}^{(vac)} + k \ln\left(\frac{(N+n)!}{N!n!}\right)$

Stirling: $\ln N! \approx N \ln N - N$

$$\Delta G_n = n\left(\Delta H_f^{(vac)} - T\Delta S_{vib}^{(vac)}\right) - kT \ln\left(\frac{(N+n)!}{N!n!}\right)$$

$$\frac{\partial \Delta G_n}{\partial n} = \Delta H_f^{(vac)} - T\Delta S_{vib}^{(vac)} + kT \ln\left(\frac{n}{N+n}\right) \to 0$$

$$\Rightarrow C_{vac}(T) = \frac{n}{N+n} = e^{\frac{\Delta S_{vib}^{(vac)}}{k}} \cdot e^{\frac{-\Delta H_f^{(vac)}}{kT}} = C_0 e^{\frac{-\Delta H_f^{(vac)}}{kT}}$$

Q: Voldoen alle soorten puntfouten aan verband bij $\uparrow$

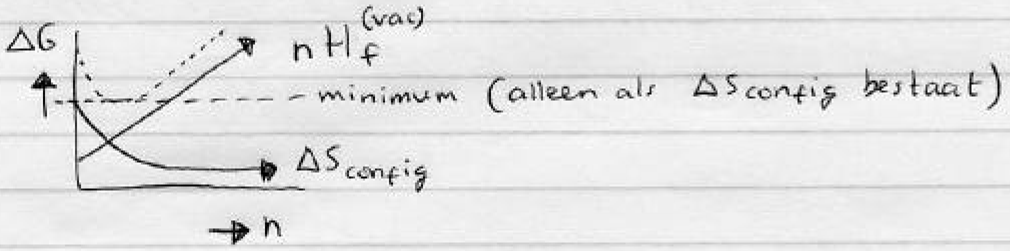
A: Neen. Structurele vacatures (bijv. voor ladingsbehoud) voldoen niet aan bovenstaande verband.

Zelf-interstitiëlen voldoen wel aan bovenstaand verband, maar met $H_f^{(int)} \sim 10 \cdot H_f^{(vac)}$

SOEPERTENTAMEN

Q: Geef een soortgelijke beschouwing, maar nu voor dislocaties

A: ΔS_{config} -term bestaat niet voor dislocaties. Dit betekent dat ΔG geen minimum heeft → geen evenwicht concentratie



(Dit geldt ook voor grensvlakken / korrelgrenzen)

Q: Waarom behoren thermische vacatures niet, maar lijndefecten en korrelgrenzen wel tot de microstructuur?

A: Lijndefecten en korrelgrenzen zijn niet in thermodynamisch evenwicht (zie vorige vraag) en behoren daarom <u>wel</u> tot de microstructuur.
Thermische vacatures zijn wel in thermodynamisch evenwicht en behoren daarom <u>niet</u> tot de microstructuur.

- Slipsystemen FCC, BCC, HCP

Q: FCC, BCC en HCP hebben welke en hoeveel slipsystemen.

A: FCC: $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{111\}$ 6 verschillende richtingen op 4 verschillende vlakken $\Rightarrow$ 24 slipsystemen.

BCC: $\frac{1}{2}\langle 111\rangle\{110\}$ 4 verschillende richtingen op 6 verschillende vlakken $\Rightarrow$ 24 slipsystemen.

HCP: $\langle 11\bar{2}0\rangle\{0001\}$ 6 verschillende richtingen op 1 mogelijk slipvlak $\Rightarrow$ 6 slipsystemen

Q: OP volgorde van ductiel naar bros FCC / BCC, HCP / FCC

A: HCP is brosser dan FCC omdat in HCP materialen cross-slip moeilijker of niet gaat. In HCP moet cross-slip plaatsvinden via vlakken met mindere dichtheid, terwijl in FCC cross-slip via elkaar snijdende, dichtst-bepakte $\{111\}$ vlakken kan gaan.

BCC is brosser dan FCC omdat dislocaties in BCC materialen "uitgewaaierd" voorkomen (non-planar core). Er is meer spanning nodig om dislocaties te verplaatsen dan in FCC materialen.

SOEPERTENTAMEN

Q: Komen er ook partiële dislocaties voor in bcc materialen en waarom?

A: Nee, de stacking fault energie in bcc materialen is te hoog:

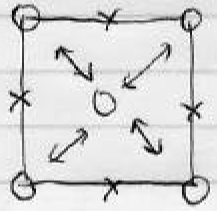
$$E_{\substack{\text{partiele}\\ \text{splitsing}}} \sim \frac{1}{\gamma_{SF}}$$

$\rightarrow \gamma_{SF}$ erg groot $\Rightarrow E_{\substack{\text{partiele}\\ \text{splitsing}}}$ erg klein

→ er is te weinig energie beschikbaar om dislocaties op te splitsen.

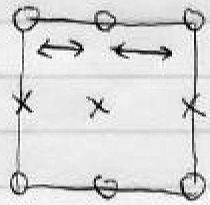
Q: Ionogene kubische kristallen (NaCl) vertonen slip op {100}, {110} en {111} vlakken, hoeveel verschillende slipsystemen bestaan er van ieder van die vlakken

A:

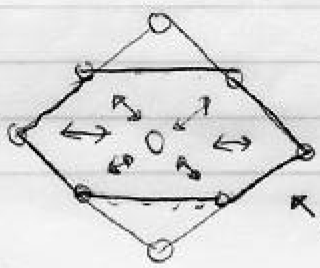


richtingen x vlakken

$\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{100\} \rightarrow 4 \times 3 = 12$



$\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{110\} \rightarrow 2 \times 6 = 12$



$\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{111\} \rightarrow 6 \times 4 = 24$

(24)

regelmatige zeshoek

SOEPERTENTAMEN

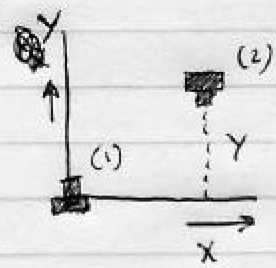
Q: In welke gevallen treedt {111} slip op in NaCl en geen slip op de in beginsel gunstiger {110} vlakken?

A: Normaal worden ladingsneutrale slipvlakken gepreferreerd, zoals {110} vlakken, maar de minder gunstige slip over {111} vlakken (niet ladingsneutraal) kan optreden bij hoge aangelegde spanning (high stress), vooral bij hoge temperaturen en in crystals die makkelijk polariseerbaar zijn (high polarizobility), waar de "ionic nature" van de bindingen minder wordt.

- Krachtenspel tussen randdislocaties

Q: Twee randdislocatier van tegengesteld teken bevinden zich op parallelle slipvlakken t.o.v. elkaar. Beschrijf het krachtenspel als functie van de afstand tussen de twee dislocaties. (isotrope lineaire elasticiteitsleer)

A:



$$\vec{F} = \vec{\vec{\Sigma}} \cdot \left(\vec{b} \times \vec{\xi}\right)$$

$$\vec{\vec{\Sigma}} \qquad \vec{b}$$

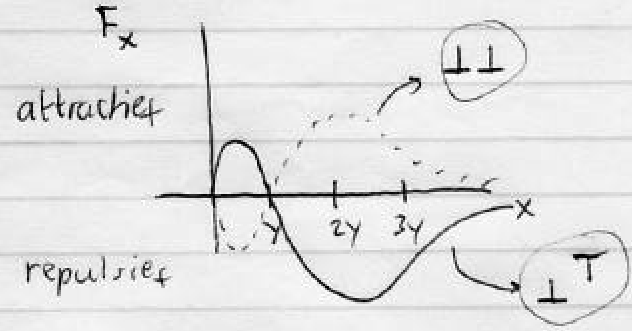
$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx}\hat{x}\hat{x} & \sigma_{xy}\hat{x}\hat{y} & 0 \\ \sigma_{yx}\hat{y}\hat{x} & \sigma_{yy}\hat{y}\hat{y} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}\hat{z}\hat{z} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_x\hat{x} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_{xx}\hat{x}\, b_x \\ \sigma_{yx}\hat{y}\, b_x \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{F} = \left(\vec{\vec{\Sigma}} \cdot \vec{b}\right) \times \vec{\xi} = \begin{bmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \sigma_{xx} b_x & \sigma_{yx} b_x & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} F_x &= -\sigma_{yx}^{(1)} b_x^{(2)} \\ F_y &= +\sigma_{xx} b_x \end{aligned}$$

$$\vec{\xi} \rightarrow$$

(de min in $\vec{\xi}$ vanwege tegengesteld teken)

$$F_x = \frac{-\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$



Q: Veronderstel dat één van die dislocaties vervangen wordt door een zuivere schroef. Wat wordt in dat geval het krachtenspel.

A: Spanningsveld (σ) gaat evenredig met de burgers vector, de burgersvector van een schroef staat loodrecht op die van een rand:

$$\vec{F} = \vec{\vec{\Sigma}}^{(1)} \cdot b^{(2)} \times \vec{\xi}$$

$$\vec{\vec{\Sigma}} \sim b^{(1)}$$

$$\Rightarrow \vec{F} \sim b^{(1)} \cdot b^{(2)} = 0$$

(immers: schroef: alleen $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$ en $\sigma_{xz} = \sigma_{zx} \neq 0$
rand: alleen $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy} = \sigma_{yx} \neq 0$)

Q: hoe verandert de fysische beschrijving indien anisotrope elasticiteitsleer wordt betrokken in de bovenstaande 2 beschouwingen.

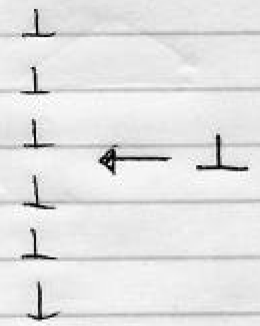
A: Bij anisotrope elasticiteitsleer heeft een schroefdislocatie ook randdislocatie componenten, en andersom (schroefcomponenten bij rand)

$$\Rightarrow b^{(rand)} \cdot b^{(schroef)} \neq 0$$

→ wel interactie tussen rand en schroef.

Q: Gebruik de eerdere beschouwing om een fysische beschrijving (niet een wiskundige) te geven als een zuivere randdislocatie in fcc een tilt korrelgrens loodrecht nadert

A:



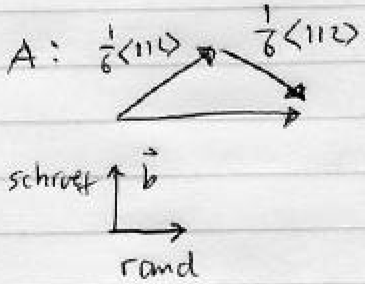
→ som van alle $\sum \sigma_{xy}^{(tilt)}$ nemen om krachten spel te bepalen ipv. 1 σ_{xy}.

$$\sigma \sim \frac{1}{r} \quad \rightarrow \quad \sum \frac{1}{r_i}$$

De naderende dislocatie wordt aangetrokken / afgestoten tot de dislocatie op een "evenwichtsafstand" van de tilt grens komt.

SOEPERTENTAMEN

Q: Is er een verschil indien de dislocatie in fcc opgesplitst voorkomt in twee Shockley partiële dislocaties?

A: 

→ als de dislocaties opgedeeld worden in shockley partials, krijgen ze schroef-componenten. Deze componenten leveren 0 op in de interactie met de tiltgrens

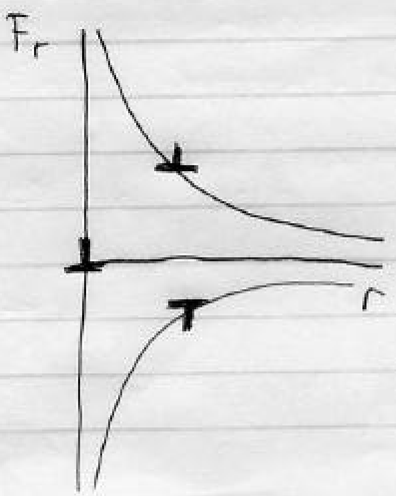
⇒ In totaal heb je met shockley partials minder interactie

Opmerking: krachten tussen 2 schroef dislocaties:

$$F_r = \sigma_{z\theta} b$$

$$F_\theta = \sigma_{zr} b$$

$F_r = \mu b^2 / 2\pi r$ $\qquad$ $F_\theta = 0$



- Euler, spanningscomponenten, isotroop / anisotroop

Q: Waarom is de burgers geen echte vector in de mathematische zin van betekenis.

A: Een burgers vector hangt af van de dislocatie lijn richting ($\vec{\xi}$ line sense), een normale vector hangt er niet van af.

Q: Hoeveel spanningscomponenten zijn aanwezig voor een rand en voor een schroef dislocatie in een isotroop en hoeveel in een anisotroop lineair elastisch medium? Waarom?

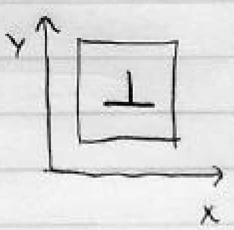
A: isotroop lineair elastisch medium:

$$\sigma_{xx} = 2Ge_{xx} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$
$$\sigma_{yy} = 2Ge_{yy} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$
$$\sigma_{zz} = 2Ge_{zz} + \lambda(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$
$$\sigma_{xy} = 2Ge_{xy}$$
$$\sigma_{yz} = 2Ge_{yz}$$
$$\sigma_{zx} = 2Ge_{zx}$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \qquad (\sigma_{xz} = \sigma_{zx},\ \sigma_{yz} = \sigma_{zy},\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx})$$

(Want $\sum \vec{M} = 0$, anders ~~gaat~~ is materiaal niet stationair)

$$e_{kl} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right)$$

randdislocatie: 

$\Rightarrow$ verplaatsingsvelden in x en y richting
$u_x \neq 0$, $u_y \neq 0$, $u_z = 0$

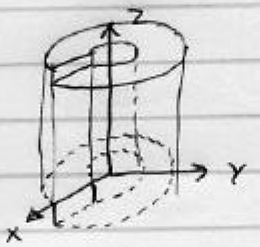
u_x en u_y niet afhankelijk van z

$\Rightarrow$ alleen $e_{xx}, e_{yy}, e_{xy} = e_{yx}$ zijn $\neq 0$

dus: $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy} = \sigma_{yx}$ zijn niet 0

$\Rightarrow$ 4 spanningscomponenten aanwezig voor een randdislocatie

schroefdislocatie



$$u_z = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

alleen verplaatsingsveld in z-richting aanwezig, en dat is afhankelijk van x en y
$\Rightarrow$ alleen $\frac{\partial u_z}{\partial x}$ en $\frac{\partial u_z}{\partial y}$ levert iets op

$\Rightarrow$ alleen e_{zx} $(= e_{xz})$ en e_{zy} $(= e_{yz})$ zijn niet 0

$\Rightarrow$ σ_{zx} en σ_{zy} zijn niet 0

$\Rightarrow$ 2 spanningscomponenten aanwezig voor een schroefdislocatie

Anisotroop: $\sigma_{ij} = \sum_k \sum_l c_{ijkl} e_{kl}$

$\Rightarrow$ alle 6 onafhankelijke σ_{ij} componenten zijn niet 0 voor rand en schroef.

SOEPERTENTAMEN

Q: Welke fysische aannames maak je om het spanningsveld van een willekeurige dislocatie af te leiden in een anisotroop lineair elastisch medium.

A: 1) lineaire elasticiteit $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$,

stationair $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0$

2) $\left.\begin{array}{l} u_x = u_x(x,y) \\ u_y = u_y(x,y) \end{array}\right\}$ rand , $u_z = u_z(x,y)$ } schroef

3) $\sigma \sim \frac{1}{r}$

4) $\oint \Delta \vec{u} = \vec{b}$ (kringintegraal om verplaatsingsveld = burgers vector)

5) $\frac{\vec{F}}{L} \to 0$ (kracht op dislocatielijn per lijnlengte $\to 0$)

Q: Welke spanningscomponenten / elasticiteitsconstanten ~~[illegible]~~ ~~componenten~~ zijn ongelijk nul ~~[illegible]~~ van een randdislocatie in een anisotroop lineair elastisch medium.

A: $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\, e_{kl}$, $e_{kl} = e_{lk}$ en $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

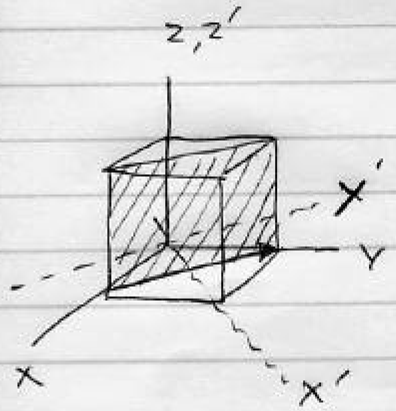
$\Rightarrow$ 6 x 6 onafh. componenten: $C_{ijkl} \to C_{mn}$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & \cdots & C_{16} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{61} & \cdots & C_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \\ \gamma_{12} \end{bmatrix}$$

ij kl	11	22	33	23	31	12
↓ ↓ m n	1	2	3	4	5	6

SOEPERTENTAMEN

systeem $\langle 110 \rangle \{110\}$



$x' \rightarrow [110]$: 2 tallig

$y' \rightarrow [\bar{1}10]$: 2 tallig

$z' \rightarrow [001]$: 4 tallig

$C_2(x)$: $x \Rightarrow x$, $y \Rightarrow -y$, $z \Rightarrow -z$

xx	-y-y	-z-z	-y-z	x-z	x-y
1	2	3	4	-5	-6

$$\hookrightarrow \begin{bmatrix} 11 & 12 & 13 & 14 & \cancel{-15} & \cancel{-16} \\ & 22 & 23 & 24 & \cancel{-25} & \cancel{-26} \\ & & 33 & 34 & \cancel{-35} & \cancel{-36} \\ & & & 44 & \cancel{-45} & \cancel{-46} \\ & & & & 55 & 56 \\ & & & & & 66 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow -15 = 15$ (v.g.l. oorspronkelijke matrix)

$\Rightarrow C_{15} = 0$

evenzo voor andere elementen

$C_2(y)$: $x \Rightarrow -x$, $y \Rightarrow y$, $z \Rightarrow -z$

-x-x	yy	-z-z	y-z	-x-z	-xy
1	2	3	-4	5	-6

+ info van vorige

$$\hookrightarrow \begin{bmatrix} 11 & 12 & 13 & \cancel{-14} & 0 & 0 \\ & 22 & 23 & \cancel{-24} & 0 & 0 \\ & & 33 & \cancel{-34} & 0 & 0 \\ & & & 44 & 0 & 0 \\ & & & & 55 & \cancel{-56} \\ & & & & & 66 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow -14 = 14$

$\rightarrow C_{14} = 0$

evenzo voor andere elementen

yy	-x-x	zz	-xz	yz	y-x
2	1	3	-5	4	-6

$C_4(z)$: $x \Rightarrow y$, $y \Rightarrow -x$, $z \Rightarrow z$

↳ + info van vorige

$$\begin{bmatrix} 22 & 21 & 23 & 0 & 0 & 0 \\ & 11 & 13 & 0 & 0 & 0 \\ & & 33 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 55 & 0 & 0 \\ & & & & 44 & 0 \\ & & & & & 66 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ 23 = 13
22 = 11
55 = 44

$\Rightarrow$ uiteindelijk:

$$C = \begin{bmatrix} 11 & 12 & 13 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & 11 & 13 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & 13 & 33 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 44 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 44 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 66 \end{bmatrix}$$

$C_{11, 12, 13, 33, 44, 66}$ zijn de 6 onafhankelijke coefficiënten

Spanningscomponenten.

rand: $e_{11}, e_{22}, \gamma_{12} \neq 0$

$$[\sigma] = [C]\begin{bmatrix} e \\ \gamma \end{bmatrix}$$

$\cancel{\sigma_{ij}}$

$$\Rightarrow \sigma_{11} = C_{11} e_{11} + C_{12} e_{22}$$
$$\sigma_{22} = C_{12} e_{11} + C_{11} e_{22}$$
$$\sigma_{33} = C_{13} e_{11} + C_{13} e_{22}$$
$$\sigma_{23} = 0$$
$$\sigma_{13} = 0$$
$$\sigma_{12} = C_{66} \gamma_{12}$$

SOEPERTENTAMEN

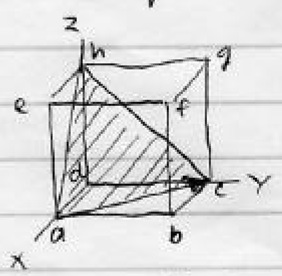
schroef : alleen γ_{23} en γ_{13} bestaan

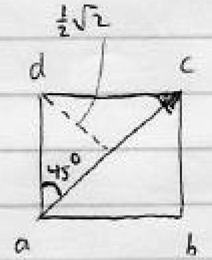
$$\Rightarrow \quad \sigma_{23} = C_{44}\gamma_{23}$$
$$\sigma_{13} = C_{44}\gamma_{13}$$

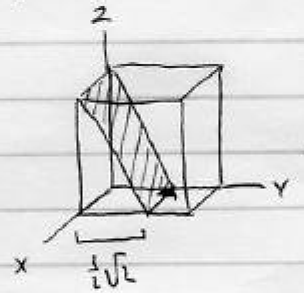
andere σ's zijn 0

Q: Op welke wijze kun je de uitdrukking van het spanningsveld van een $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{111\}$ randdislocatie transformeren naar een randdislocatie in een $\frac{1}{2}\langle 111\rangle\{110\}$ systeem

A: Gebruik Euler rotaties om de transformatiematrix te bepalen. (Oude coordinaat systeem → nieuwe systeem)

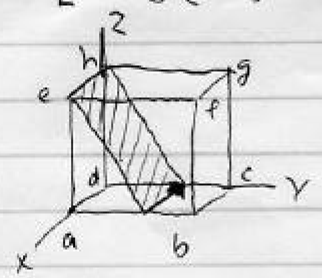


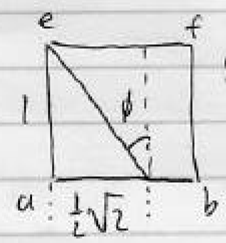




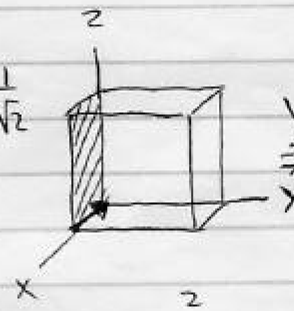
vlak $+45^\circ$ om Z
$\Rightarrow$ Assenstelsel -45° om Z

$[\bar{1}10](111)$

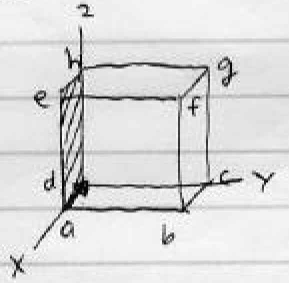


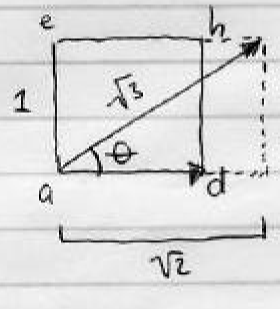


$\phi = \arctan \frac{1}{\sqrt{2}}$

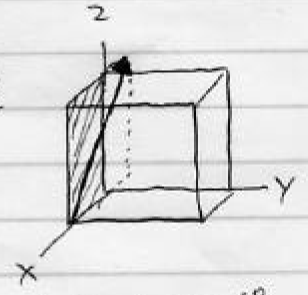


vlak $-35{,}26^\circ$ om X
$\Rightarrow$ Assenstelsel $+35{,}26^\circ$ om X



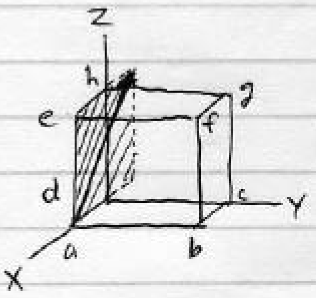


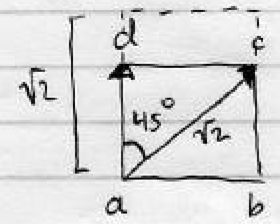
$\theta = \arctan \frac{1}{\sqrt{2}}$

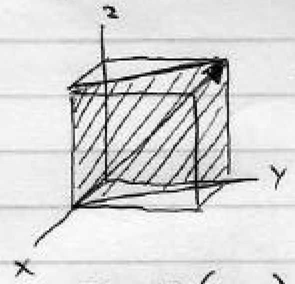


vlak $+35{,}26^\circ$ om Y
$\Rightarrow$ Assenstelsel $-35{,}26^\circ$ om Y

SOEPERTENTAMEN







vlak -45° om Z
$\Rightarrow$ Assenstelsel
$+45^\circ$ om Z

$[\bar{1}11]\,(110)$

- Voor draaiingen gebruik je de rechterhand regel: duim in de positieve richting van de as waarom je draait. De richting waarin je vingers draaien als je ze "intrekt" is de positieve draairichting. Uitstrekken geeft de negatieve draairichting

- Verder: als je een vlak draait om hoek $+\theta$, is dat equivalent aan assenstelsel draaien om de hoek $-\theta$.

De transformatiematrix wordt:

$$\left[4^e \text{ rotatie}\right] \cdot \left[3^e \text{ rot.}\right] \cdot \left[2^e \text{ rot}\right] \cdot \left[1^e \text{ rot}\right] = A$$

Rotatiematrices:

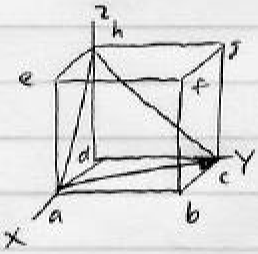
$$R_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \quad R_y = \begin{bmatrix} \cos\phi & 0 & -\sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\phi & 0 & \cos\phi \end{bmatrix} \quad R_z = \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Dus:

$$A = R_z(+45^\circ) \cdot R_y(-35{,}26^\circ) \cdot R_x(+35{,}26^\circ) \cdot R_z(-45^\circ)$$

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\approx \begin{bmatrix} 0{,}64983 & -0{,}16667 & 0{,}74158 \\ 0{,}16667 & 0{,}98316 & 0{,}074915 \\ -0{,}74158 & 0{,}074915 & 0{,}66667 \end{bmatrix}$$

controle: 

$a: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ transformeren : $A \cdot a = \begin{pmatrix} 0{,}64983 \\ 0{,}16667 \\ -0{,}74158 \end{pmatrix} = a'$

$c: \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow A \cdot c = \begin{pmatrix} -0{,}16667 \\ 0{,}98316 \\ 0{,}074915 \end{pmatrix} = c'$

$h: \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow A \cdot h = \begin{pmatrix} 0{,}74158 \\ 0{,}074915 \\ 0{,}66667 \end{pmatrix} = h'$

$\overrightarrow{ac}$ is na transformatie $\overrightarrow{a'c'} = c' - a' = \begin{pmatrix} -0{,}8165 \\ 0{,}8165 \\ 0{,}8165 \end{pmatrix} = [\bar{1}11]$ &
$[\bar{1}10]$

$\overrightarrow{ac} \times \overrightarrow{ah}$ is na transformatie $\overrightarrow{a'c'} \times \overrightarrow{a'h'} = \begin{pmatrix} 1{,}22475 \\ 1{,}22475 \\ 0 \end{pmatrix} = (110)$ &
(111)

Dus matrix A transformeert $\langle 110 \rangle \{111\} \rightarrow \langle 111 \rangle \{110\}$

$$u_i' = a_{ij} u_j \qquad \left(A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{13} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{31} & \cdots & a_{33} \end{pmatrix} \right)$$

$$e_{ij}' = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j'} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i'} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i'} = \frac{\partial x_j}{\partial x_i'} \frac{\partial}{\partial x_j} = a_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j}$$

$$\Rightarrow e_{ij}' = \frac{1}{2}\left(a_{jm} \frac{\partial}{\partial x_m}\left(a_{il} u_l\right) + a_{il} \frac{\partial}{\partial x_l}\left(a_{jm} u_m\right)\right)$$

$$= a_{jm} a_{il} \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l} \right)}_{e_{lm}} = a_{jm} a_{il} e_{lm}$$

analoog: $\sigma_{ij}' = a_{il} a_{jm} \sigma_{lm}$

$$\downarrow$$

p.s. : $\sigma_{ij}' = a_{il} a_{jm} c_{lmpq} e_{pq}$

$$= a_{il} a_{jm} c_{lmpq} a_{rp} a_{sq} e_{rs}'$$

$$\sigma_{ij}' = c_{ijrs}' e_{rs}'$$

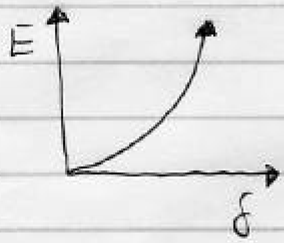
$$\Rightarrow c_{ijrs}' = a_{il} a_{jm} a_{rp} a_{sq} c_{lmpq}$$

p.p.s. : σ_{ij} = stress = spanning
e_{ij} = strain = rek
c_{ijkl} = elasticiteitsconstante
u_i = verplaatsing (sveld)

- Grensvlak energie, mispassing

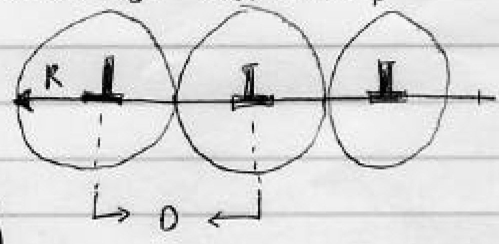
Q: Beschrijf het verloop van de grensvlakenergie van een coherent grensvlak als functie van de mispassing

A: $E = \int \underset{\sigma \sim \varepsilon}{\underbrace{\sigma}} \, d\varepsilon \rightarrow \int \underset{\varepsilon \sim \delta}{\underbrace{\varepsilon}} \, d\varepsilon \rightarrow \sim \delta^2$ (δ = mispassing)



Q: Leidt een uitdrukking af voor de grensvlak energie van een semi-coherent grensvlak als functie van de mispassing tussen twee verschillende roosters met roosterparameters, respectievelijk α_α en α_β

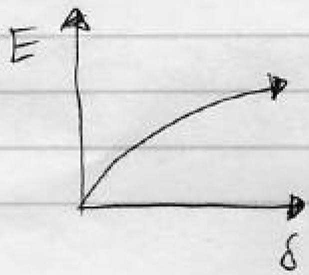
A: $\delta = \dfrac{\alpha_\beta - \alpha_\alpha}{\alpha_\alpha}$



$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \cdot \ln\left(\frac{R}{r_{core}}\right)$$

$D \approx \dfrac{b}{\delta}$, $b = (\alpha_\alpha + \alpha_\beta)/2$

$E \sim \ln \delta$

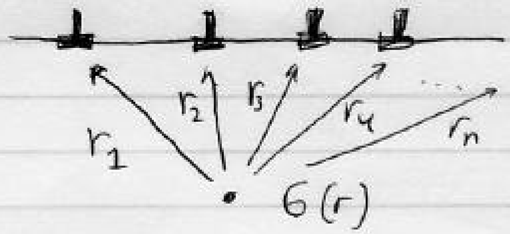


Q: Schets het verloop van de componenten van de spanningstensor als functie van de afstand tot een semi coherent grensvlak.

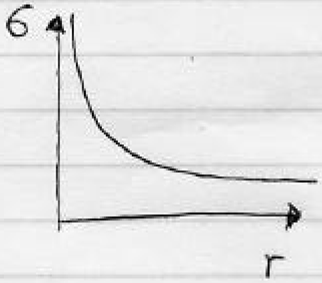
A: (niet zeker)

$$\sigma \sim \frac{1}{r}$$

semi coherent:



$$\Rightarrow \quad \sigma \sim \sum_i \frac{1}{r_i}$$



- Elektronenmicroscoop.

Q: Welke diffractiecondities zou je in een transmissie elektronen microscoop hanteren om een rand en een schroef dislocatie volledig te benoemen. Welke fysische aannames maak je?

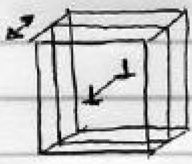
A: structuurfactor

$|F|^2 \rightarrow \vec{g} \cdot \vec{R}$

burgers vector $\vec{b}$

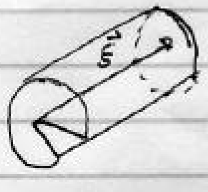
verplaatsingsveld

afwijking van bragg-conditie

* Rand  → vlakken loodrecht op de dislocatie lijn hebben geen afwijking tussen die vlakken. (Er zijn wel afwijkingen IN die vlakken)

$\vec{g} \cdot \vec{b} \rightarrow 0$

→ je moet die diffractie condities ($\vec{g}$) aflopen die $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ opleveren.

* Schroef 

→ alle vlakken die $\vec{\xi}$ bevatten hebben geen verandering tussen die vlakken

$\vec{g} \cdot \vec{b} \rightarrow 0$

Q : Welke abberaties bepalen het oplossend vermogen van een transmissie electronen microscoop en Waarom?

A : Spherische abberaties

$$\Delta r_S \Rightarrow C_S^{1/4} \lambda^{3/4}$$

Q: Wat is het verschil tussen dynamische en kinematische diffractiecondities?

A : kinematisch: amplitude verandert niet als functie van de diepte $\rightarrow \phi = \phi_0$

dynamisch: amplitude van de electronen beam is wel afhankelijk van de diepte $\phi = \phi(z)$

Q: Wat is het verschil tussen sferische en chromatische abberaties en welke is bepalend voor de structurele resolutie

A : spherische abberatie

$\Delta r_i = C_S \alpha^3$ $\rightarrow$ electronen die het object op een plaats P verlaten, komen via de lenzen op ~~plaat~~ een afstand Δr_i van de ideale plaats P' op de image-plane terecht.

chromatische abberatie

$$\Delta r_c = C_c \cdot \alpha \cdot \frac{\Delta E}{E}$$

objective aperture angle

Elektronen "voelen" een objektief-lens met fluctuerende focus-afstand.

ΔE door
* verschillen in initial velocities van electronen
* ruis in hoogspanningsbron
* verschillende afkets-snelheden van electronen die van sample ketsen

Spherische abberaties zijn bepalend voor structurele resolutie

Q: Hoe verbeter je de resolutie van een TEM.

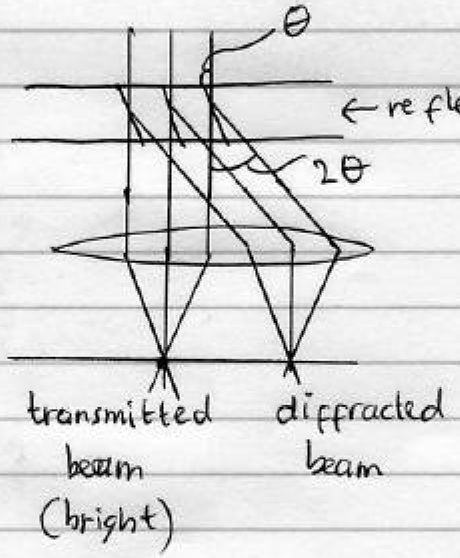
A: $\Delta r_s \Rightarrow C_s^{1/4} \lambda^{3/4}$

1) Lensfouten verbeteren (sferische abberatie coefficient kleiner maken)

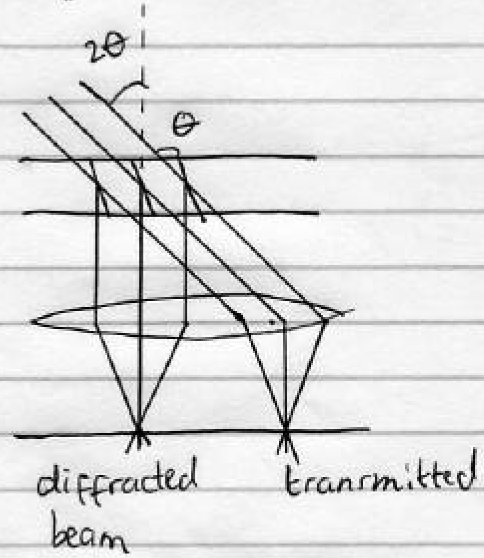
2) $\lambda \sim \frac{1}{\sqrt{V_{acc}}}$ → Versnelspanning van elektronen verhogen.

Q: Beschrijf de intensiteit v.e. doorgaande electronenbundel in BF (Bright Field) en DF (Dark Field) door een materiaal met stapelfout die door het boven en benedenvlak wordt begrensd.

A: BF



DF



→ licht met donkere stippen

→ donker, met lichte stippen

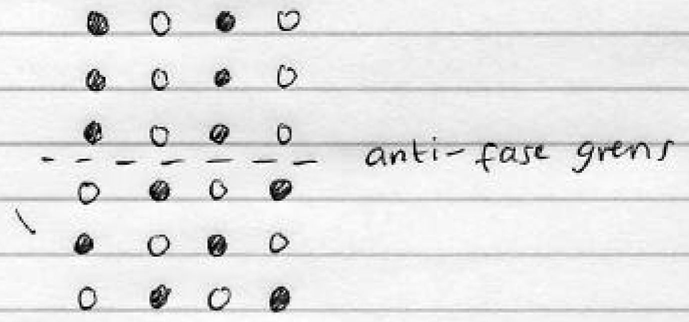
transmitted beam on optic axis

diffracted beam on optic axis

- Definities, korte beschrijvingen

Q: Anti-fase grens

A:



grens tussen twee fasen in een materiaal

Q: ~~Soupe~~ Super rooster dislocatie

A: $\perp \langle 110 \rangle$ → dislocatie in super rooster

$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ ///// $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ → opgesplitst

APB
(anti phase boundary)

Q: Σ - korrelgrens

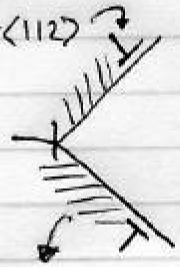
A: Korrelgrens waarbij beide roosters van beide korrels, indien over elkaar geschoven, overlappende roosterpunten hebben.

Σ is gedefinieerd als $\Sigma = \left(\text{samenvallende punten}/_{\text{oppv.}}\right)^{-1}$

(CSL-structuur (coïncident site lattice))

Q: Lomer-Cottrell 'lock'

A: $\frac{1}{6}\langle 112\rangle$



twee shockley partials ($\frac{1}{6}\langle 112\rangle$'s) komen samen op de snijlijn van twee slipvlakken, en vormen een dislocatie waarvan de resultante $\vec{b}$-vector niet op een slipvlak ligt → gelocked

Q: Diffussievergelijkingen van Fick

A:

Fick I : $J = -D\frac{\partial C}{\partial x}$

J = flux $\left(\frac{\text{atomen}}{\text{oppv}} \cdot s^{-1}\right)$

D = diffusie coefficient

C = concentratie

Fick II : $\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$

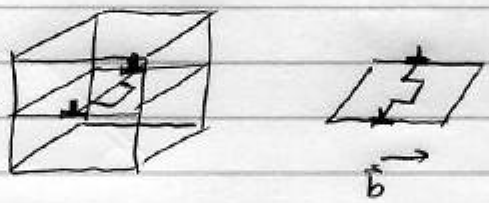
Q: Stair rod dislocatie

A: Als twee Shockley partiele dislocaties op verschillende slipvlakken samenkomen, kunnen ze een stair-rod dislocatie vormen:

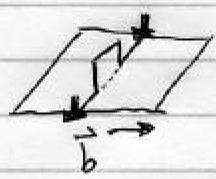
$$\frac{1}{6}\langle 112\rangle + \frac{1}{6}\langle 112\rangle \rightarrow \frac{1}{6}\langle 110\rangle$$

(lijkt op een tapijt dat op een trap ligt). Deze dislocatie is sessile.

Q: Kink
A: Een dislocatie-stap in het slipvlak



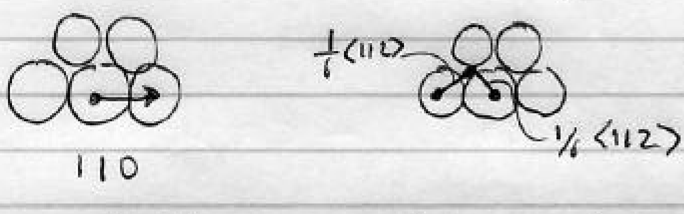
Q: Jog
A: Een dislocatie-stap loodrecht op het slipvlak



Q: Sessile dislocation
A: De burgers vector van een sessile dislocation ligt niet in een slipvlak en kan dus niet bewegen door glide. (Hij kan e.v.t. wel bewegen door klim).

Q: Shockley partial dislocation
A: Een $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ dislocatie kan zich opsplitsen in twee $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ shockley partial dislocations:

$$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \rightarrow \frac{1}{6}\langle 112 \rangle + \frac{1}{6}\langle 112 \rangle$$



Als twee Shockleys van elkaar af bewegen zit er een stacking fault tussen:

$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$

$\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ //////// $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$

S.F.

SOEPERTENTAMEN

Q: Frank's partiële dislocatie

A: De fout gevormd door het toevoegen of uitnemen van een dichtgepakte {111} laag van atomen.

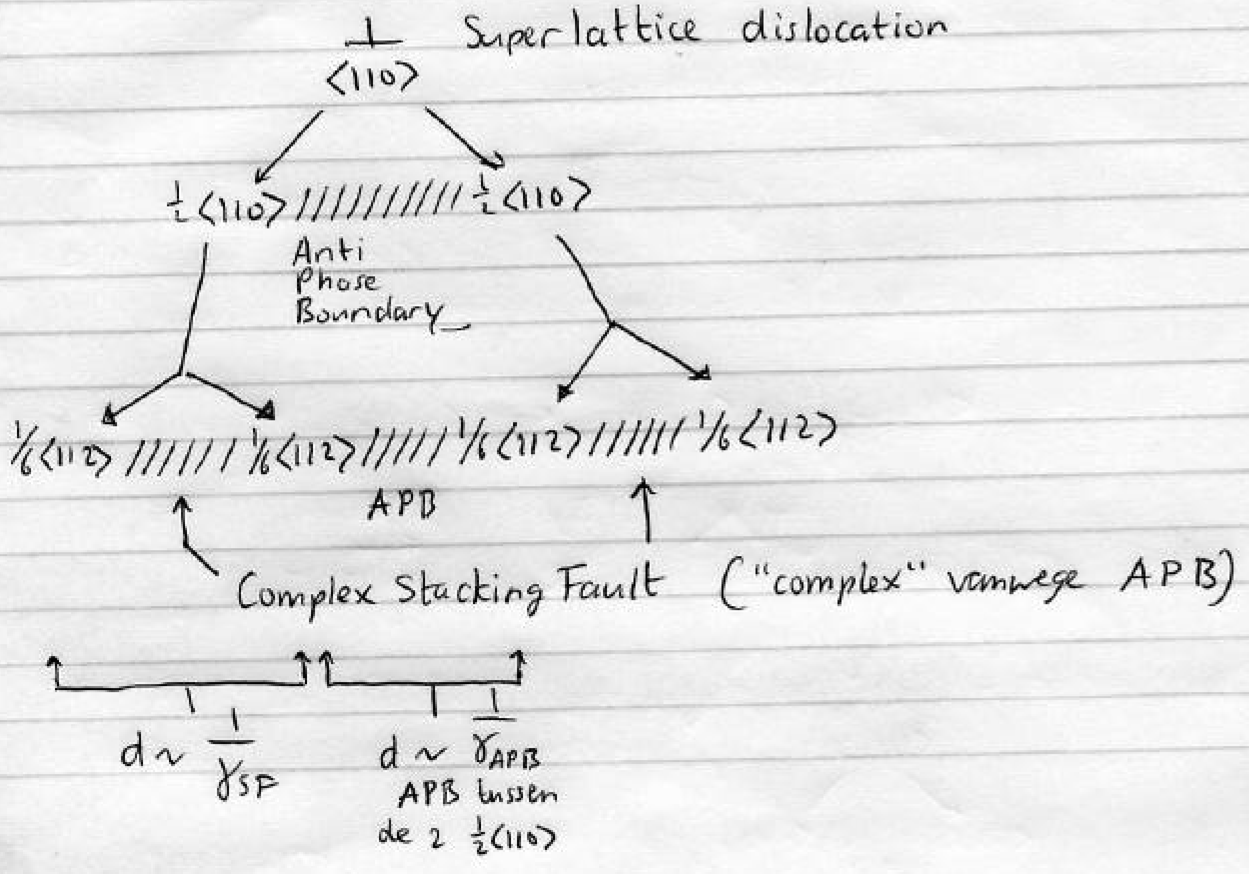
Verwijderen → intrinsieke fout A B C A C A B C
B

toevoegen → extrinsieke fout A B C A B A C A B

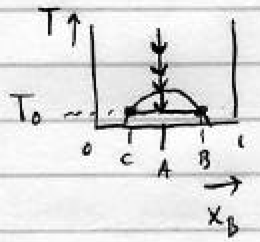
De burgersvector staat loodrecht op het extra vlak en de grootte ervan is de ruimte geproduceerd door een dichtgepakte laag $\frac{1}{3}\langle 111\rangle$.

Het is een sessile dislocation, omdat de burgersvector niet in een slipvlak ligt.

Q: Complex stacking fault



Q : Spinodale ontmenging
A : In materialen met een miscibility gap is het energetisch gunstiger om van een egale compositie te ontmengen in gebiedjes ~~van~~ (2 soorten gebiedjes) van 2 verschillende composities :



een materiaal dat bestaat uit één fase met compositie A, "splitst" zich na afkoeling tot T_0 in gebieden met compositie C en compositie B

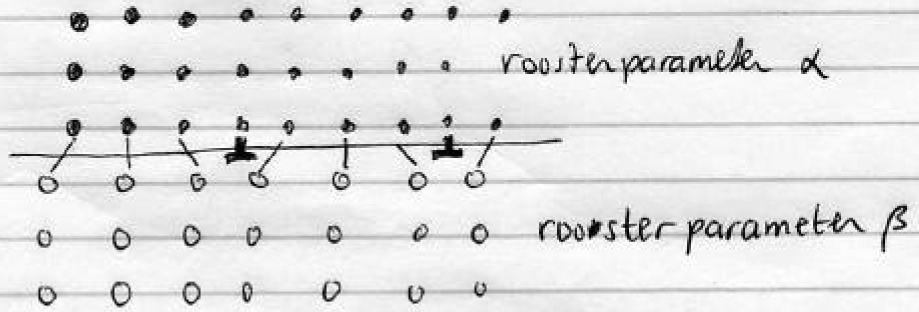
Q : Reguliere oplossing
A :

$\Delta H_{mix} \neq 0$

$\Delta S = \Delta S$ ideaal $\qquad \Delta S_{excess} = 0$

quasi chemisch : $A \leftrightarrow A + B \leftrightarrow B \rightarrow 2\, A \leftrightarrow B$

Q : Semi coherent grensvlak
A :



Reductie van elastische energie (vanwege $\alpha \neq \beta$) door productie van lijnfouten