

2.4 Ableitung von Materialparametern aus den Bindungspotentialen

2.4.1 Ableitung des E-Moduls

Was man aus dem Bindungspotential direkt lernen kann

Die Kenntnis des Bindungspotentials U_{Bindg} , d.h. die genaue Form des Potentialtopfes gegeben durch

$$U_{\text{Bindg}} = - \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

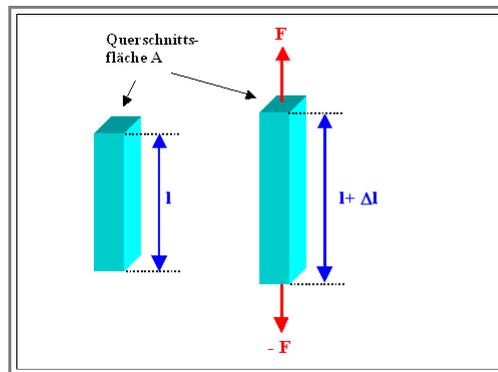
oder durch eine der möglichen anderen [Näherungsformeln](#), erlaubt bereits, wesentliche **mechanische Eigenschaften** der Festkörper zu berechnen. Es sind dies insbesondere

- Das (oder der) **Elastizitätsmodul E**
- Der **thermische Ausdehnungskoeffizient α**
- Die theoretische **Bruchspannung σ_{theo}** .
- Die **Schwingungsfrequenz ν_0**

Allgemeine Definition von E , σ und ϵ

Um das (in Übungsaufgaben) tun zu können, müssen wir diese Größen erst definieren.

- Dazu betrachten wir den Elementarversuch zu allen mechanischen Materialeigenschaften, den **Zugversuch**.
- Wir nehmen eine Probe bekannter Geometrie (für die echten Versuche **DIN**-genormt) und ziehen mit einer Kraft F daran. Die Probe wird dann - solange sie nicht bricht - auf jeden Fall länger. Hat sie vor dem Versuch die Länge l , wird sie unter Krafteinfluß die Länge $l + \Delta l$ haben. Dies ist im nachfolgenden Bild schematisch gezeigt.



Die Längenänderung Δl wird bei einem "dicken" Körper mit großer Querschnittsfläche A kleiner sein, als bei einem schlanken Körper desselben Materials.

- Um dieselbe Längenänderung Δl zu erreichen muß man offenbar dieselbe **mechanische Spannung σ** anlegen, d.h. **Kraft pro Fläche**.

$$\sigma = \frac{F}{A}$$

- Wir werden zukünftig immer σ verwenden und bei mechanischen Problemen nicht mehr von Kräften sondern von (mechanischen) **Spannungen** reden.
- Die Maßeinheit für mechanische Spannungen ist das **Pascal**; abgekürzt **Pa**. Ein Pascal ist definiert als **1 Pa = 1 N/m² = 1 Newton pro Quadratmeter**.
- Man könnte das natürlich mit der *elektrischen* Spannung verwechseln, aber aus dem Kontext ist auch ohne das Adjektiv "mechanisch" praktisch immer klar um was es geht.

Da ein langer Körper bei derselben Spannung eine größere Längenänderung zeigen wird als ein kurzer, ist es zweckmäßig auch die Längenänderung so zu normieren, daß sie von der Ausgangslänge des Probekörpers unabhängig wird.

- Dies wird durch die Definition der **Dehnung** ϵ erreicht:

$$\epsilon(\sigma) = \frac{\Delta l}{l} = \frac{l(\sigma) - l_0}{l_0} = \frac{l(\sigma)}{l_0} - 1$$

- $l(\sigma)$ ist dabei die jeweilige, von der Spannung abhängige Länge und l_0 die Ausgangslänge für $\sigma = 0$.
- Die Dehnung hat in dieser Definition *keine Maßeinheit*, sie ist dimensionslos. Multipliziert man den Zahlenwert mit **100**, hat man die Verlängerung des Körpers in *Prozent* %.

Damit läßt sich für Körper mit konstantem Querschnitt verallgemeinern: Bei gleicher Spannung wird immer die gleiche Dehnung auftreten, unabhängig von den Dimensionen des Körpers.

- Macht man einen realen Zugversuch, findet man im **elastischen Bereich** eine eindeutige Beziehung zwischen σ und ϵ , d.h. $\epsilon = \epsilon(\sigma)$.
- Elastischer* Bereich heißt, daß für jeden Wert von σ sich immer der gleiche Wert von ϵ einstellt. Dies bedeutet insbesondere, daß bei *Wegnehmen der Spannung*, der Körper wieder seine ursprüngliche Länge hat.
- Dies muß nicht so sein; wer schon mal sein Auto gegen ein Hindernis gefahren hat weiß, daß es auch *inelastische* oder **plastische Dehnungen** gibt - nach Wegnehmen der mechanischen Spannungen ist die alte Form nicht wieder hergestellt! Im Link kann man einen [Großversuch](#) zu *nicht*elastischen Verformungen bewundern.
- Für den elastischen Bereich einer $\sigma - \epsilon$ Kurve läßt sich jedoch als Materialkonstante der (oder das) **Elastizitätsmodul E** (kurz **E - Modul**) definieren als

$$E = \frac{d\sigma}{d\epsilon}$$

- Und niemals werden wir **E** , den *Elastizitätsmodul*, mit der *Gesamtenergie E* oder der *elektrischen Feldstärke E* verwechseln!

Sollte, was sehr häufig der Fall ist, zwischen σ und ϵ eine **lineare** Beziehung vorliegen, gilt einfach:

$$\sigma = E \cdot \epsilon$$

- Der **E -Modul** ist sozusagen die **Federkonstante** des Materials.

E-Modul und Bindungen

Wenn wir im [obigen Bild](#) gedanklich die Atome einzeichne, wird sofort klar, dass man beim Ziehversuch zumindest bei Kristallen schlicht und ergreifend die Bindungen "langzieht".

- Niemand hindert uns nun, die Querschnittsfläche **A** der Fläche einer Bindung (also Atomabstand²) zu setzen. Dann können wir den **E -Modul** aus dem "Langziehen" *einer* Bindung erhalten (oder vieler Bindungen, falls wir eine Atomkette nehmen; die Dehnung ist aber davon unabhängig).

Obige Potentialformel gibt nun an, um wieviel sich der Abstand zweier Atome ändert, wenn eine Kraft $F = -dU/dr$ anliegt. Darin steckt in eindeutiger Weise der Elastizitätsmodul des Festkörpers. Um ihn sinnvoll zu berechnen muß man:

1. Die Konstanten **A** und **B** durch den Gleichgewichtsabstand r_0 und die Bindungsenergie $E_{\text{Bind}} = U_0$ ersetzen. (Wir verwenden hier U_0 statt E_{Bind} um Verwechslungen mit dem *E-Modul* auszuschließen).
2. Die wirkende Kraft dann aus $-dU/dr$ berechnen.
3. Zu Spannungen und Dehnungen übergehen. Hinweis: Kraft *pro* Bindung durch Fläche *pro* Bindung (= $(r_0)^2$) verwenden; gleichermaßen $\epsilon = (r - r_0)/r_0$ setzen.

Wir machen das als Übungsaufgabe:

Übungsaufgabe2.4-1

Berechnung des *E*-Moduls aus dem Bindungspotential

Als Ergebnis erhält man

$$E = \frac{1}{r_0} \cdot \frac{d^2U(r)}{dr^2} = \frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^3}$$

Eine ziemlich einfache Formel für einen der wichtigsten mechanischen Materialparameter!

Für technische Zwecke, oder einfach nur um ein gutes Gefühl für Zusammenhänge zu bekommen, läßt sich diese Formel noch weiter vereinfachen, zu einer "**Faustformel**".

Faustformeln sind allerdings mit einer gewissen Vorsicht zu genießen, da sie manchmal ziemlich weit weg von der Realität liegen können.

Wir ersetzen einfach r_0^3 durch Ω , das Atomvolumen (dies ist leicht über die Dichte des Festkörpers zu erhalten), und die Bindungsenergie U_0 durch kT_m , d.h. [Boltzmannkonstante](#) mal Schmelzpunkttemperatur.

Die letztere Ersetzung ist eine zweifelhafte Sache, aber um ein Material zu schmelzen müssen die Bindungen aufgehen, und dazu braucht man thermische Energie kT in dieser Größenordnung

Wir erhalten damit

$$E \approx \frac{\text{const.} \cdot kT_m}{\Omega}$$

Falls wir für m , n die (ungefähren) Zahlenwerte einsetzen ergibt sich eine extrem einfache **Faustregel**

$$E \approx \frac{80 \cdot kT_m}{\Omega}$$

Das ist nun wirklich eine simple Formel, die aber gar nicht so schlecht ist. Sie stimmt ganz gut für alle Bindungstypen und Materialien, wie in [einem speziellen Illustrationsmodul gezeigt](#). Aber es gibt eine **große Ausnahme**; vergleiche einen [weiteren Illustrationsmodul](#)!

Aus Bindungspotentialen abgeleiteten Werte für den *E*-Modul von "**Gummi**", d.h. für die Unterklasse der **Elastomere** bei den Polymeren, sind um mehrere Größenordnungen falsch - auch wenn man alle Fehlerquellen und Näherungen ausschaltet! Das wird uns noch ziemlich beschäftigen.

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 2.4

Man kann den *E*-Modul aber auch noch viel grundsätzlicher betrachten; das wird in diesem ["advanced" Modul](#) gemacht.