

2.4.5 Merkpunkte zu Kapitel 2.4: Ableitung von Materialparametern aus den Bindungspotentialen

Aus den Bindungspotentialen folgen direkt die defekt- oder strukturunempfindlichen Eigenschaften der Materialien:

- Der **Elastizitätsmodul** $E = \sigma/\epsilon$ als eine Art "Federkonstante" der Bindung ($\sigma =$ mech. Spannung = Kraft / Fläche; $\epsilon =$ Dehnung = relative Längenänderung). Ω ist das Atomvolumen.
- Der thermische Ausdehnungskoeffizient α als "Maß" für die Assymetrie des Potentialtopfes.
- Maximale Bruchspannung σ_f oder anschaulicher max. Bruchdehnung ϵ_f . Allerdings sind die errechenbare Werte hier nicht so sinnvoll, das sie nur die absolute Obergrenze angeben.
- Schwingungsfrequenz ω der Atome um ihre Gleichgewichtslage.

$$E = \frac{n \cdot m}{r_0^3 \cdot U_0} \approx \frac{80 \cdot kT}{\Omega}$$

$$\alpha = \frac{(n + m + 3)k}{2 \cdot n \cdot m \cdot U_0} \approx \frac{\text{const.}}{T_m}$$

$$\epsilon_f = \left(\frac{n + 1}{m + 1} \right)^{1/(n - m)} - 1 \approx (15 - 30)\%$$

$$\omega = \left(\frac{E \cdot r_0}{m_a} \right)^{1/2} \approx 10^{13} \text{ Hz}$$

Insbesondere der **E-Modul** und die Schwingungsfrequenz sind von großer Bedeutung.

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 2.4