

2.1.2 Bindungspotentiale, Federn und Elastizitätsmodul

Potential einer Feder und Federkonstante

Wir beginnen diesen Modul mit einer Aufgabe zu einer **idealen Feder**, die man *unbedingt machen*, aber auf jeden Fall ansehen und nachvollziehen sollte (Lösung vorhanden)!

Übungsaufgabe

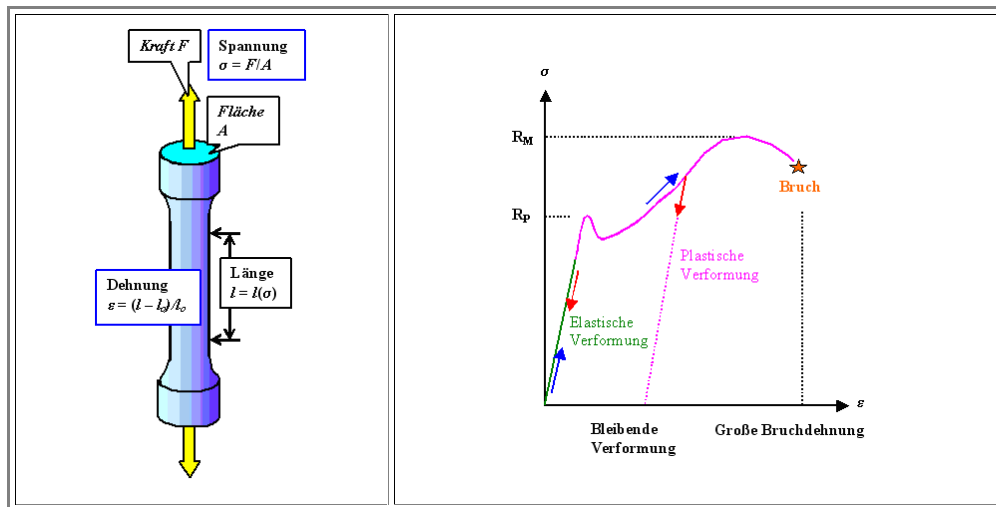
Aufgabe 2.1-1

Dann schauen wir uns mal einen simplen Versuch an: Wir ziehen eine Feder lang. Wir nehmen aber keine Sprungfeder (technisch korrekt: Schraubenfeder), sondern der Einfachheit halber nur einen zylindrischen Draht.

- Falls wir eine Sprungfeder nehmen würden, hätte die Feder eine Länge l_{Fed} , der Draht, aus dem sie gewickelt ist, aber eine viel größere Länge l_{Dra} . Zieht man die Feder um ein Δl_{Fed} lang, verlängert sich der Draht selbst nur um $\Delta l_{\text{Dra}} \approx \Delta l_{\text{Fed}} \cdot (l_{\text{Fed}} / l_{\text{Dra}})$; außerdem wird er auch noch tordiert (= verdreht).
- Das ist uns zu kompliziert, wir ziehen deshalb gleich an einem geraden Draht der Ausgangslänge l_0 .
- Je nach angelegter Kraft F wird der Draht um ein Δl länger werden, und wir können eine "Federkonstante" $k_{\text{Fed}} = F / \Delta l$ definieren. Wenn wir einen dickeren oder kürzeren Draht aus demselben Material nehmen oder den Draht jetzt wickeln, resultieren jeweils andere "Federkonstanten".

Das Verhalten des Materials gegenüber mechanischer Belastung ist aber eine **Materialeigenschaft**, die man sinnvollerweise mit einer **einzig**en Zahl beschreibt. Dazu müssen wir uns von den Dimensionen unabhängig machen und zu **spezifischen Größen** übergehen; exakt so wie vom Widerstand eines Materials (gemessen in Ω) zum spezifischen Widerstand. (gemessen in Ωcm).

- Das machen wir zunächst durch zwei simple Definitionen anhand der unten schematisch dargestellten Geometrie bei einem **Zugversuch**.
- Nebenbei nehmen wir schon mal zur Kenntnis, dass der **Zugversuch** das paradigmatische Experiment zur Bestimmung der "mechanischen" Eigenschaften **aller** Festkörper ist!



Was man bei einem duktilen = plastisch verformbaren Material typischerweise findet ist in dem **Spannungs-Dehnungs-Diagramm** rechts gezeigt. Nach einem rein elastischen Bereich kommt vor dem **endgültigen Bruch** noch ein duktiler Bereich. Wir interessieren uns hier aber nur für den elastischen Bereich.

E-Modul statt Federkonstante

Für eine gegebene Kraft wird die Längenänderung Δl 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. dieselbe **Kraft pro Fläche**. Damit ist **mechanische Spannung** definiert als

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

- 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 auch 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 Probenkörpers 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; l_0 ist 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** %. ("% ist übrigens **keine** Maßeinheit!)
- Damit läßt sich für Körper mit konstantem Querschnitt verallgemeinern: Bei gleicher Spannung wird immer die gleiche Dehnung auftreten, unabhängig von den Dimensionen des Körpers.

**Gleiche Spannung produziert
gleiche Dehnung**

- Macht man einen realen **Zugversuch**, findet man im linearen **elastischen Bereich** eine eindeutige Beziehung zwischen σ und ϵ , d.h. $\sigma = \sigma(\epsilon)$.
- 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 (inkl. Brüche und Flüche).
- Für den elastischen Bereich einer σ - ϵ -Kurve läßt sich jedoch als Materialkonstante der (**nicht** "das") **Elastizitätsmodul E** (kurz **E-Modul**) definieren als

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

Der E-Modul wird uns noch hinreichend beschäftigen. In Kürze deshalb nur einige wichtige Punkte:

- Die Maßeinheit des E-Moduls ist **[N/m²]** oder Pascal **[Pa]**, d. h. sie ist identisch zu der [Maßeinheit der Spannung](#).
- Werte liegen maximal um **10³ GPa** für sehr harte Materialien (Diamant, Keramik), um **10² GPa** und darunter für normale Metalle ("Stahl"), und um **1 GPa** bis herunter zu **10⁻² GPa** für weiche Materialien (Holz - Styropor, Gummi). [Mehr dazu im Link](#).
- Der E-Modul von Mixturen (Stahlbeton; Faserverstärkte Kunststoffe,..) ist eine Art Mittelwert des E-Moduls der Komponenten.
- Der E-Modul wird bei den elektrischen Eigenschaften der Dielektrika noch wichtig werden!

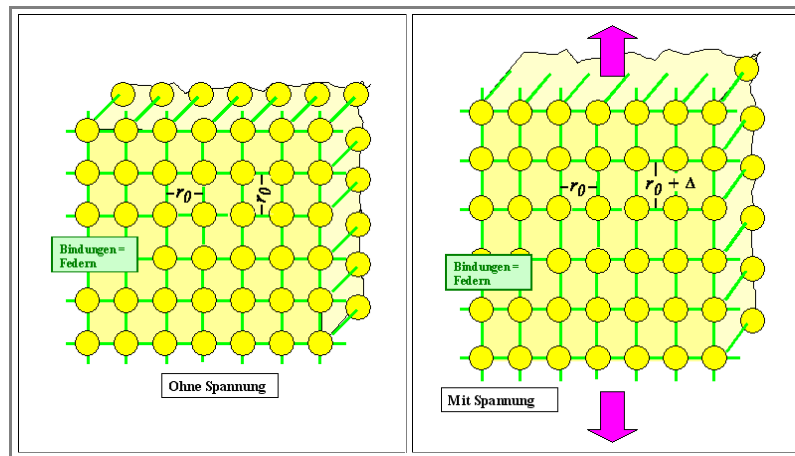
Was ist nun der Zusammenhang zwischen der "effektiven Federkonstanten" **k_{Fed}** einer Bindung und dem E-Modul des Materials?

- Das ist so einfach, dass wir es in einer [schnellen Übung](#) tun.
- Heraus kommt **k_{Fed} = E · r₀** mit **r₀** = Bindungsabstand oder ungefähr "Gitterkonstante" (was das ist, lernen wir später; auch dieses Ergebnis leiten wir weiter unten ausführlich her).

Mikroskopische Betrachtung des E-Moduls

Wir machen jetzt etwas sehr Wichtiges: Wir setzen uns eine virtuelle Brille auf, mit der wir unter extrem hoher Vergrößerung in Materialien hineinschauen können. Solche "Brillen" gibt's auch real, man nennt sie "**Hochauflösungstransmissionselektronenmikroskop**" (**HRTEM**); im Kieler Nanolabor steht eines herum.

- Virtuell** kommt's aber deutlich billiger; wir sparen so um die **2 Mio €**. Wenn wir mit unserer virtuellen **HRTEM**-Brille unserem (kristallinen) Prüfkörper beim Langgezogenwerden zuschauen, sehen wir dies (*Hinweis: "Sehen" tun wir mit dem Gehirn, nicht mit den Augen*):



Wir sehen: Beim Zugversuch (im elastischen Bereich) ziehen wir (bei allen Kristallen und den meisten amorphen Materialien) schlicht und ergreifend die Bindungen in Zugrichtung "lang".

- Das ist eine monumentale Erkenntnis! Wir haben eine erste nicht-triviale Eigenschaft von Materialien auf fundamentale Parameter – **die Bindungen** – zurückgeführt (wenigstens im Prinzip).

Jetzt **berechnen** wir mal schnell den E-Modul aus dem als bekannt vorausgesetzten **Bindungspotential**, und zwar im linearen Bereich (d. h. für kleine elastische Verformungen). Dazu setzen wir die Querschnittsfläche der Zugprobe auf r_0^2 (r_0 ist der Abstand zwischen den Atomen oder die "Gitterkonstante" unseres [kubischen] Kristalls). Mit andern Worten: Wir ziehen nur **eine** Bindung lang!

- Darf man das? – Wer sollte es verbieten? Der gesamte Effekt beim Langziehen einer Probe ist schließlich nur die Summe der Effekte der Bindungen. Man kann es übrigens heutzutage sogar experimentell machen!

Um den Abstand eines Atoms in irgendeiner Anordnung mit Bindungsabstand r_0 zu seinen Nachbarn zu ändern, muß eine Kraft F_{Atom} angreifen, die dann auf die für das Atom (im Kristall) spezifische Fläche $A = r_0^2$ wirkt.

- Die auf ein Atom bezogene Spannung $\sigma = F/A$ ist damit

$$\sigma = \frac{F_{\text{Atom}}}{r_0^2}$$

- Der Abstand zu den Nachbarn wird sich ändern, die zugehörige Dehnung ϵ (in Zugrichtung) ist

$$\epsilon(\sigma) = \frac{r(\sigma) - r_0}{r_0}$$

- Die Kraft F_{Atom} , um **gegen** das Bindungspotential das Atom zum Ort r zu bringen, ist direkt durch die **Ableitung des Potentials** $U(r)$ gegeben, wir haben $F_{\text{Atom}} = +dU(r)/dr$.

- Wir haben jetzt ein **Plus-** anstelle eines Minuszeichens, denn wir betrachten jetzt die äußere Kraft, die **gegen** die rücktreibende Kraft des Potentials "arbeitet" (Zugversuch!).

Der E-Modul E war definiert als

$$E = \frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{d[F_{\text{Atom}}/r_0^2]}{d\epsilon}$$

wobei wir für kleine elastische Verformungen die Ableitung dann natürlich an der Stelle $\epsilon = 0$ (das entspricht $r = r_0$) nehmen müssen.

- Setzt man alle Beziehungen von oben ein, berücksichtigt die Kettenregel

$$\frac{dF_{\text{Atom}}}{d\epsilon} = \frac{dF_{\text{Atom}}}{dr} \cdot \frac{dr}{d\epsilon}$$

und berechnet $dr/d\epsilon = r_0$, erhält man

$$E = \frac{1}{r_0^2} \cdot \frac{dF_{\text{Atom}}}{dr} \cdot \frac{dr}{d\epsilon} = \frac{1}{r_0^2} \cdot \frac{d^2U}{dr^2} \cdot r_0$$

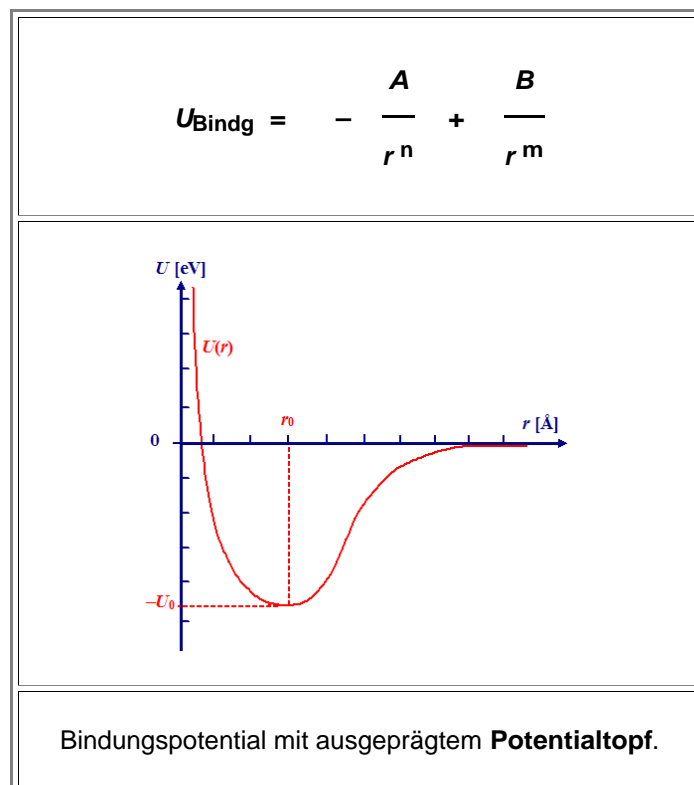
$$E = \frac{1}{r_0} \cdot \frac{d^2U}{dr^2}$$

- Aha! Der E-Modul "steckt" komplett in der 2. Ableitung des Bindungspotentials!

- Falls unser Bindungspotential um das Minimum herum halbwegs "harmonisch" ist, d.h. der Parabel einer [idealen Feder](#) entspricht, ist die 2. Ableitung eine Konstante – eben die "**Materialkonstante**" Elastizitätsmodul.
- Das können wir leicht prüfen: Falls $E = d\sigma / d\epsilon = \text{const}$ wirklich gilt, messen wir im Zugversuch als Verformungsdiagramm $\sigma(\epsilon)$ eine exakte Gerade. Aus evtl. Abweichungen von einer exakten Geraden können wir auf Abweichungen des Bindungspotentials von einer Parabel schließen.

Wir werden radikal

- Für das Bindungspotential eines beliebigen Materials haben wir uns schon eine relativ [allgemeine Näherungsformel](#) erarbeitet; sie lautet



- Wir haben 4 Unbekannte in dieser Gleichung: **A**, **B**, **m**, **n**, über die wir nicht allzuviel wissen. Was wir jedoch wissen - weil es einfach zu messen ist - sind die Zahlenwerte für den **Gleichgewichtsabstand** r_0 und für die **Bindungsenergie** U_0 .
- Wir machen also folgendes: Wir substituieren **A** und **B** durch r_0 und U_0 , differenzieren die erhaltene Gleichung 2 mal, teilen das Ergebnis durch r_0 und erhalten den E-Modul als Funktion von U_0 , r_0 , **m** und **n**.

● Viel Glück!

⚡ Schon wieder stoßen wir auf ein typisches Problem der MaWi: Die Mathematik wird schnell mal (etwas) anspruchsvoll; das Ergebnis ist aber einfach. Es lautet:

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

⚡ Warum ist die Mathematik anspruchsvoll? Weil wir für die Substitution Gleichungen n -ten (oder m -ten) Grades zu lösen haben, und dafür gibt es für $n > 4$ kein "Rezept" (= Lösungsformel) mehr!

● Wer mal schauen will, wie gut sie in Mathe ist, kann's gern mal probieren. Hier ist [der Link](#) zu dieser Extra Aufgabe für Spezialistinnen.

⚡ Der Rest glaubt's einfach (oder schaut die [Lösung](#) zur obigen Aufgabe an) und überlegt sich, ob man mit der obigen Formel noch was machen kann.

● Man kann. Zunächst mal nehmen wir wahr, dass r_0^3 in etwa dem Atomvolumen entspricht, das wir sehr leicht über die Dichte des Festkörpers erhalten können. Die Bindungsenergie U_0 muss etwas mit dem Schmelzpunkt T_m zu tun haben, denn am **Schmelzpunkt** gehen *per Definitionem* die Bindungen auf. Im Großen und Ganzen muss die **thermische Energie** $k_B T_m$, d.h. **Boltzmannkonstante** k_B mal Schmelzpunkttemperatur ungefähr gleich U_0 sein.

⚡ Aufgepasst! Wir haben gerade so nebenbei eine erste sehr wichtige Eigenschaft aus dem Bindungspotential "abgeleitet". Den **Schmelzpunkt** eines Materials!

● Aber es gibt eine Einschränkung: Die Gleichsetzung $U_0 = k_B T_m$ ist gut genug für qualitative oder Größenordnungsbetrachtungen, aber nicht gut genug für die Berechnung genauer Zahlenwerte für T_m .

⚡ Für den E-Modul bekommen wir jedenfalls als **Faustformel**:

$$E \approx \frac{\text{const.} \cdot k_B T_m}{r_0^3} \approx \frac{80 k_B T_m}{r_0^3}$$

● Der Faktor **80** für $n \cdot m$ und die sonstigen Näherungen ist an experimentelle Werte angepaßt.

● Das ist nun wirklich eine simple Formel, die aber gar nicht so schlecht ist. Sie stimmt ganz gut für alle Bindungstypen und fast alle Materialien, wie in [einem speziellen Illustrationsmodul gezeigt](#).

● Aber es gibt eine **große Ausnahme**; vergleiche einen [weiteren Illustrationsmodul](#) aus dem MaWi-I-Hyperskript! Man kommt mit der Faustformel nicht [unter](#) $E \approx 1 \text{ GPa}$. Was stimmt also beim **Gummi** ($E_{\text{Gum}} \ll 1 \text{ GPa}$) nicht? Wir kommen darauf zurück!

⚡ Um sicher zu sein, dass alles sitzt, machen wir noch die folgenden einfachen Übungen:

[Übungsaufgabe](#)

Aufgabe 2.1-2

[Fragebogen](#)

Einfache Fragen zu 2.1.2

[Fragebogen](#)

"Multiple Choice"-Fragen zu 2.1.2