Mechanische Eigenschaften

Die mechanischen Eigenschaften von Festkörpern werden im Wesentlichen von folgenden Einfluss-größen bestimmt:

- Art und Stärke der interatomaren Bindungen
- Verteilung von Verunreinigungen und Defekten
- Dispergierte Phasen und innere Grenzflächen
- Molekularstruktur (z. B. Elastomere)

Gezielte Einflussnahme auf diese Parameter erlaubt die Variation und Optimierung der Materialeigen-schaften in weiten Bereichen.

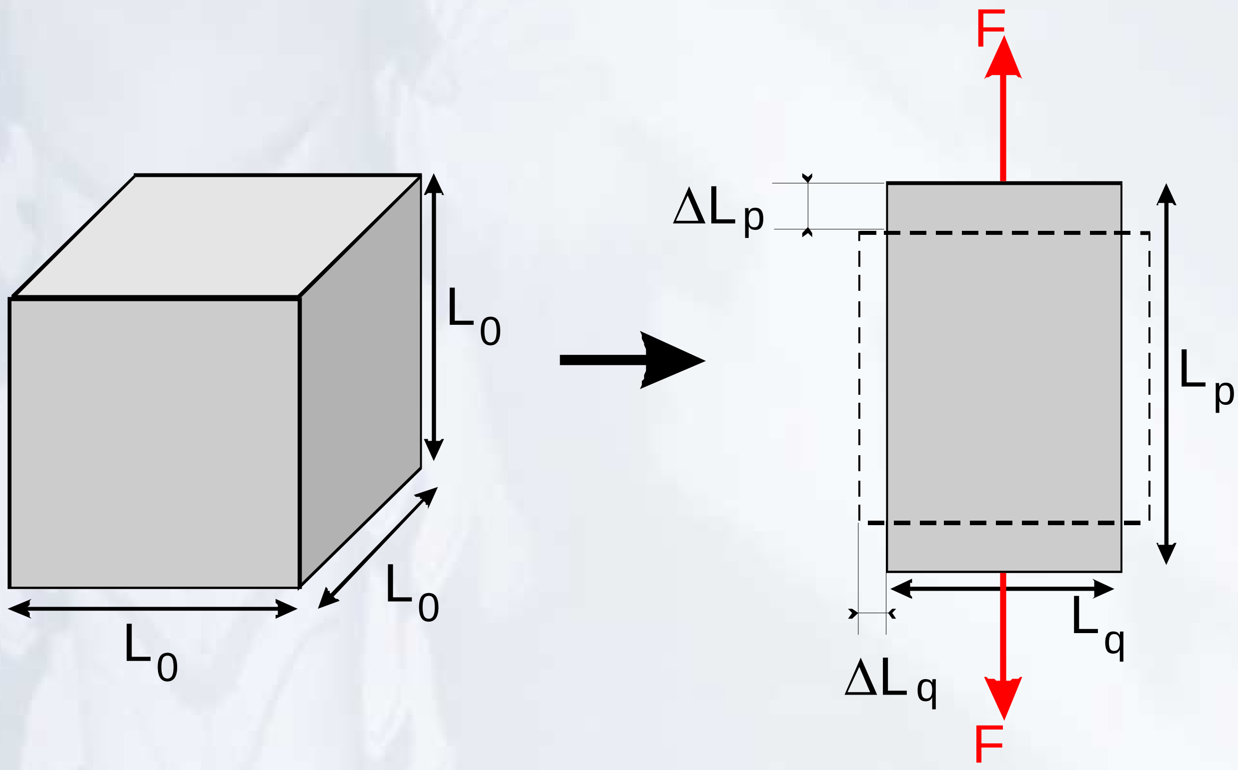
Grundgrößen der Kontinuumsmechanik

Die Vernachlässigung der atomaren Struktur des Festkörpers (allerdings *nicht seiner kristallsymme-trien!)* liefert das kontinuumsmechanische Bild des Festkörpers. Es erlaubt die Definition von vier grundlegenden Kenngrößen für die elastische (d. h. reversible) Verformung eines Festkörpers:

- Elastizitätsmodul (engl.: "Youngs Modulus")
- Querkontraktionszahl (engl.: "Poisson-Number")
- Schubmodul (engl.: "Shear Modulus")
- Kompressionsmodul

Der Ideale Zugversuch

Zur Bestimmung der kontinuumsmechanischen Grundgrößen, insbesondere von Elastizitätsmodul und Querkontraktionszahl dient der ideale Zugversuch.



L_0 ... Ursprüngliche Länge einer Würfelkante

ΔL_p ... Längen-änderung parallel zu F

ΔL_q ... Längen-änderung quer zu F

Die Verformung

Die Formänderung des Festkörpers beim idealen Zugversuch wird meist nicht über die absoluten Längenänderungen ΔL_p bzw. ΔL_q charakterisiert, sondern durch die relativen Verformungen ε_p bzw. ε_q:

$$\varepsilon_p = \frac{\Delta L_p}{L_0}$$

$$\varepsilon_q = \frac{\Delta L_q}{L_0}$$

Verformungen sind dimensionslos und werden meist in % angegeben.

Die Spannung

Die Krafteinleitung erfolgt beim idealen Zugversuch nicht punktförmig, sondern die Kraft teilt sich auf die **Angriffsfläche, A**, auf. Daraus resultiert der Begriff der **Spannung:**

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

Die Spannung hat die Einheit **[N/m²]**. Sie entspricht daher Einheitenmässig einem **Druck**.

Der Elastizitätsmodul

Der Elastizitätsmodul E ist durch folgende differentielle Beziehung definiert:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\varepsilon_p} = E}$$

In den meisten Fällen gilt die lineare Version

$$\boxed{\frac{\sigma}{\varepsilon_p} = E} \quad \textbf{bzw.} \quad \boxed{\sigma = E \cdot \varepsilon_p}$$

Auch der E-Modul hat die Einheit [N/m²]. Daher wird er auch oft in [Pa] angegeben.

Elastizitätsmodul und atomare Potentiale

Die Beziehung

$$\sigma = E \cdot \varepsilon_p$$

entspricht dem auf die Fläche bezogenen Hook'schen Gesetz:

$$\sigma[N \cdot m^{-2}] = E[N \cdot m^{-2}] \cdot \varepsilon_p \Big| \cdot [m^2]$$

$$F[N] = C[N \cdot m^{-1}] \cdot x \cdot [m]$$

Damit kann der E-Modul aus den atomaren Wechsel-wirkungspotentialen abgeschätzt werden

Elastizitätsmodul und Oszillatorpotential I

Auslenkung eines mit E_B=12 eV im Festkörper gebundenen Atoms um einer Gitterabstand von 3 Å:

$$\boxed{E_B(x) = \frac{C \cdot (x - x_0)^2}{2} \Rightarrow C = \frac{2 \cdot E_B}{(x - x_0)^2}}$$

E_B = 12 eV = 12 ·1.602 · 10^{-19} J
x-x_0 = 3 Å = 3·10^{-10} m

$$\boxed{C = 10{,}67\ \mathrm{N/m}}$$

für eine atomare Bindung.

Elastizitätsmodul und Oszillatorpotential II

Wird der Festkörper um ε_p=1% gedehnt, so entspricht das einer absoluten Längenänderung von $\Delta L_p = 3\cdot 10^{-12}$ m. Dazu muss auf jede Bindung eine Kraft von

$$\boxed{F = C \cdot \Delta L_p = 3{,}2 \cdot 10^{-11}\ \mathrm{N}}$$

Ausgeübt werden. Zur Bestimmung der Spannung σ muss noch die von einem Atom eingenommene Fläche $A=(3\cdot 10^{-10}\mathrm{m})^2 = 9\cdot 10^{-20}\mathrm{m}^2$ berücksichtigt werden:

$$\boxed{\sigma = \frac{F}{A} = 3{,}5 \cdot 10^{8}\,\mathrm{Pa}}$$

Elastizitätsmodul und Oszillatorpotential III

Der Elastizitätsmodul E ergibt sich damit zu

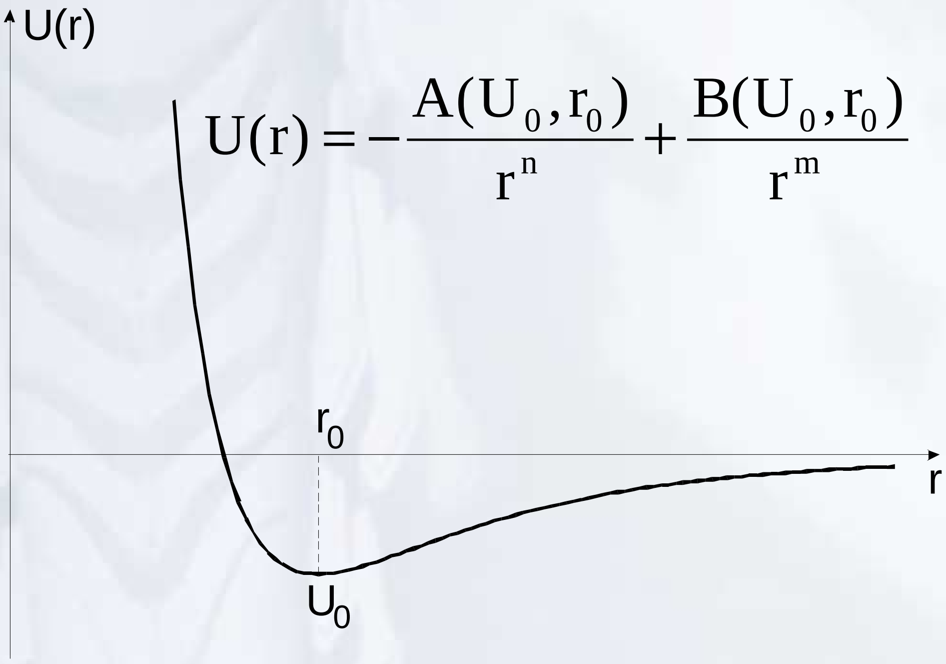
$$\mathrm{E} = \frac{\sigma}{\varepsilon_{\mathrm{p}}} = \frac{3{,}5 \cdot 10^{8}}{0{,}01} = 3{,}5 \cdot 10^{10}\,\mathrm{Pa} = 35\,\mathrm{GPa}$$

Dieser Wert ist in vernünftiger Übereinstimmung mit beobachteten E-Modulen metallischer und keramischer Materialien.

E-Modul und Lennard-Jones Potential I

Die Verwendung eines Lennard-Jones-Potentiales anstatt des Oszillatorpotentiales erlaubt die Parametrisierung des E-Modules mit typischen Kenngrössen dieses Potentiales, n, m, r_0 und U_0.

$$U(r) = -\frac{A(U_0, r_0)}{r^n} + \frac{B(U_0, r_0)}{r^m}$$



$$\boxed{E = \frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^3}}$$

r_0 = Bindungsabstand
U_0 = Bindungsstärke

E-Modul und Lennard-Jones Potential II

Einsetzen typischer Werte von n=6, m=12, ersetzen von r_0^3 durch das atomare Volumen, Ω, sowie von U_0 durch die thermische Energie $k_B T_M$, welche zum Schmelzen des Materiales aufgebracht werden muss liefert:

$$\boxed{E \cong \frac{80 \cdot k_B T_M}{\Omega}}$$

T_M = Schmelztemperatur
Ω = atomares Volumen
k_B = Boltzmannkonstante

E-Module verschiedener Materialien

Die Beziehung $E \cong \dfrac{80 \cdot k_B T_M}{\Omega}$ Erlaubt die Abschätzung der E-Module verschiedener Materialien:

Material:	T_M [K]:	Ω [m³]:	E[GPa]:
Pb	600,6	$3{,}1 \cdot 10^{-29}$	21
Fe	1809	$1{,}2 \cdot 10^{-29}$	170
W	3680	$1{,}6 \cdot 10^{-29}$	257

Die obige Abschätzung ist nur gültig, solange der Verformungsmechanismus des Materiales auf der Elongation atomarer Bindungen beruht!

Die Querkontraktionszahl ν

Die Querkontraktionszahl, oder auch "Poisson-Zahl", ν, ist definiert als das Verhältnis von Parallel- und Quer-verformung eines Prüfkörpers beim idealen Zugversuch:

$$\boxed{\nu = -\frac{\varepsilon_q}{\varepsilon_p}}$$

Für ε_q gilt daher:

$$\boxed{\varepsilon_q = -\nu \cdot \frac{\sigma}{E}}$$

Die maximale Querkontraktionszahl

Geht man davon aus, dass bei der Verformung des Festkörpers keine Volumsänderung auftritt, so gilt:

$$\boxed{\Delta V = 0 = (L_0 + \Delta L_p) \cdot (L_0 + \Delta L_q)^2 - L_0^3}$$

Unter Vernachlässigung quadratischer und kubischer Terme führt diese Beziehung zu:

$$\boxed{\varepsilon_q = -\frac{1}{2} \cdot \varepsilon_p = -\nu_{max} \cdot \varepsilon_p}$$

$\nu > 1/2$ würde eine Volumsverringerung bei Verformung bedeuten, was unphysikalisch ist.

Typische Querkontraktionszahlen

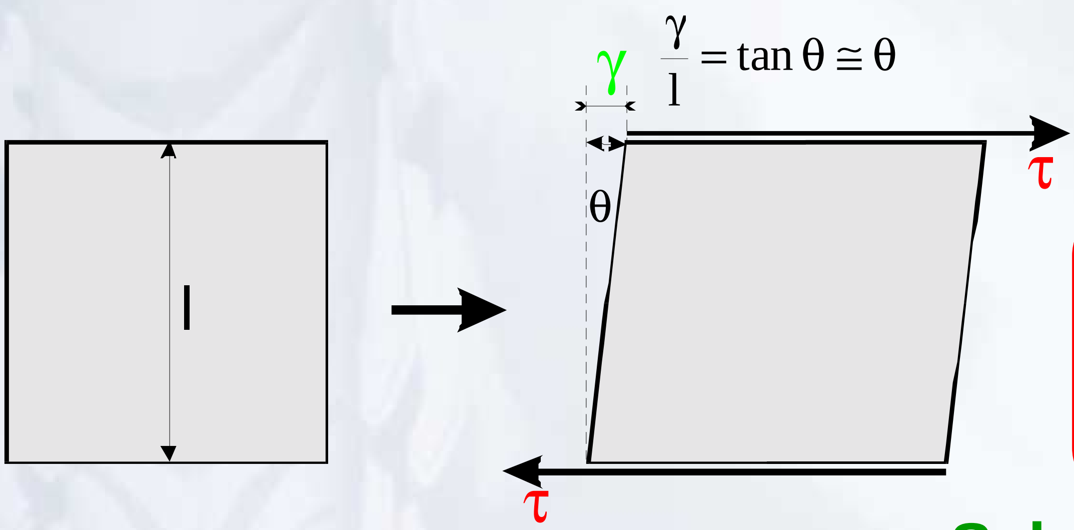
Querkontraktionszahlen variieren im Bereich von

$$\boxed{0{,}2\ (\text{Diamant}) < \nu < 0{,}5}$$

Querkontraktionszahlen nahe an den Grenzwerten kommen selten vor, da in diesen Fällen sehr hohe Dichteänderungen des Festkörpers auftreten würden, was energetisch ungünstig ist.

Der Schubmodul

Wird die Prüfkraft F = τ ·A nicht senkrecht, sondern parallel zur Seitenfläche eines würfelförmigen Prüfkörpers eingeleitet, so spricht man von reiner Scherung:



τ = Schubspannung
γ = Scherlänge

$$G = \frac{\tau}{\gamma}$$

Schubmodul,
Engl.: "Shear Modulus"

Der Kompressionsmodul

Wirken gleichgroße Kräfte von allen Seiten auf den Prüfkörper ("hydrostatische" Krafteinwirkung), so kommt es zu einer Volumsverringerung des Prüfkörpers:

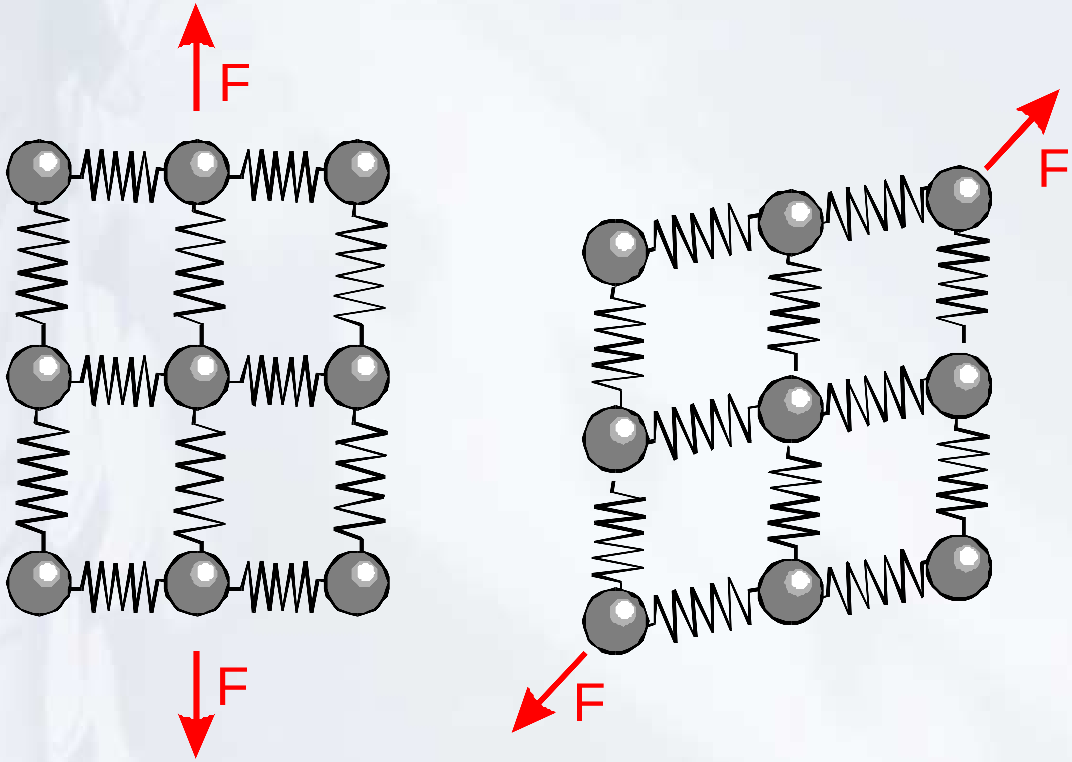
$$\boxed{\Delta V = -\frac{\sigma \cdot V_0}{K}}$$

Der Kompressionsmodul K ist definiert durch:

$$\boxed{K = -\frac{\sigma \cdot V_0}{\Delta V}}$$

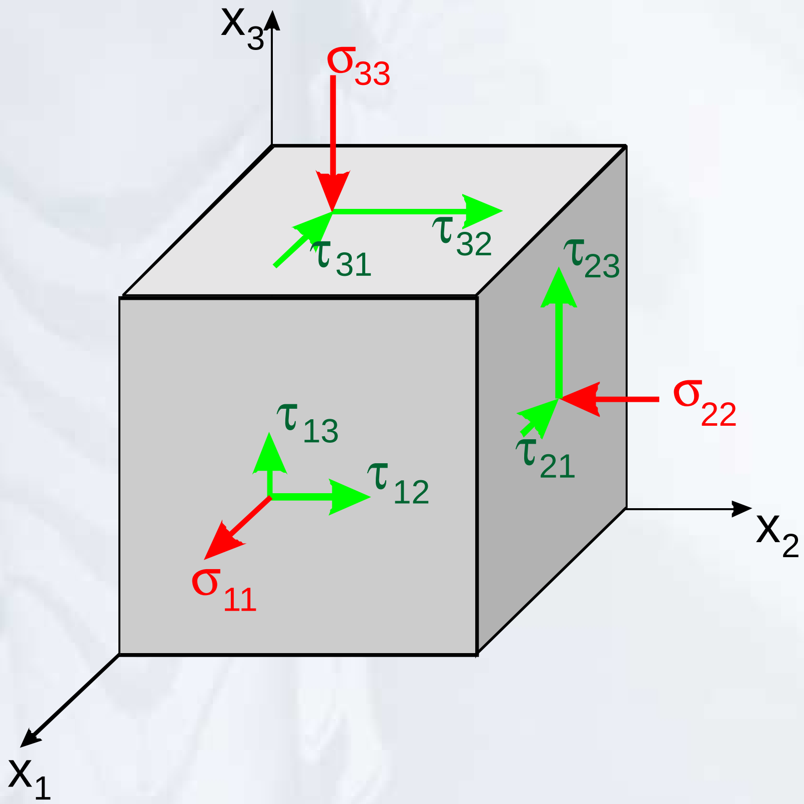
Allgemeine Krafteinleitung

Spannungen und Verformungen müssen für Kräfte gleichen Betrages nicht in gleicher weise zusammen-hängen:



Allgemeiner Spannungszustand I

Eine beliebig in einen Prüfkörper eingeleitete Kraft kann durch einen allgemeinen Spannungszustand beschrieben werden:



Es gilt:

$$\vec{F} = \sigma_{ij} \cdot \vec{A}$$

Mit dem "Spannungstensor"

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \sigma_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

Allgemeiner Spannungszustand II

Die Beziehung $F_i = \sigma_{ij} \cdot A_j$ zeigt, dass Spannungen keine Vektoren sind, sondern tensoriellen Charakter haben. Der Begriff "Tensor" leitet sich vom lateinischen Wort für Spannung ab und wurde erstmals in der Elastizitäts-theorie verwendet.

Spannungen und Verformungen sind mittels folgender Tensorbeziehung miteinander verknüpft:

$$\boxed{\sigma_{ij} = c_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl}}$$

Der Tensor 4. Stufe c_{ijkl} ist der Tensor der elastischen Konstanten und heißt auch "Elastizitätstensor".

Der Elastizitätstensor

Während über die Komponenten des Spannungstensors σ_{ij} im allgemeinen keine Aussagen getroffen werden können, so wird die Zahl der maximal 81 unabhängigen Komponenten des Elastizitätstensors c_{ijkl} im allgemeinen durch Gittersymmetrien des Festkörpers stark reduziert. Trikline Kristalle weisen 21 und kubische Kristalle nur mehr 2 unabhängige Komponenten auf.

Generell gehört die Elastizitätstheorie zu den anspruchsvollsten Teilgebieten der Physik und ist von ihrer mathematischen Struktur her mit der allgemeinen Relativitätstheorie vergleichbar.

Zusammenfassung Elastizitätstheorie

- Die reversible Verformung von Festkörpern wird durch die Elastizitätstheorie beschrieben.
- Die Elastizitätstheorie gilt immer dort, wo Verformung durch die Expansion oder Kontraktion atomarer Bindungen erfolgt.
- Für einfache Formen der Krafteinleitung in den Festkörper ist der Zusammenhang zwischen Spannung und Verformung über Elastizitätsmodul, Querkontraktionszahl, Schubmodul und Kompressionsmodul gegeben.
- Für Allgemeine Formen der Krafteinleitung ist der Zusammenhang zwischen Spannung und Ver-formung mittels tensorieller Beziehungen gegeben.

Nicht-elastische Effekte

Auch für die Beschreibung nicht-elastischer Effekte wie z. B. plastische Verformung oder Bruch kann der ideale Zugversuch herangezogen werden.

Im wesentlichen wird die im Material auftretende Spannung als Funktion der Dehnung aufgetragen.

Bei reinem Zug kann die Spannung bei bekannter Einleitungsfläche mittels einer Kraftmesszelle bestimmt werden, die Dehnung wird durch Längenmessung am belasteten Prüfkörper ermittelt.

Parameter der so erhaltenen Spannungs-Dehnungs-Kurven können die Dehnrate, die Temperatur, aber z. B. auch die Luftfeuchtigkeit im Labor sein.

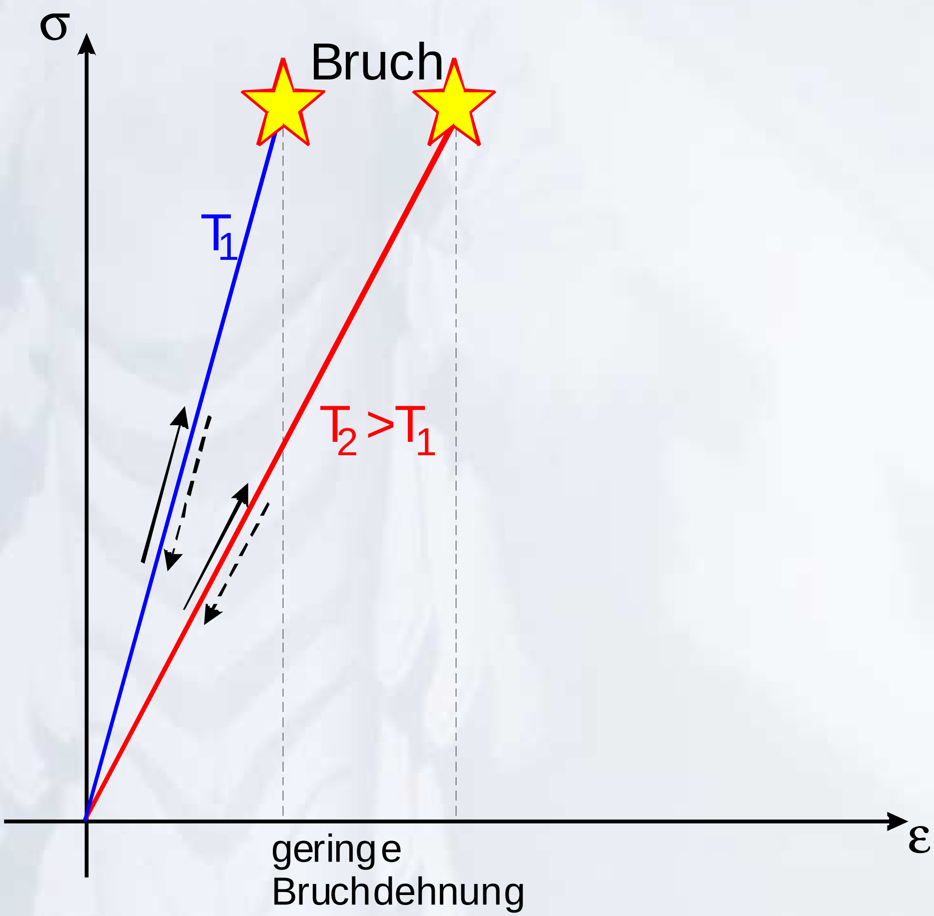
Materialklassen

Aufgrund ihrer Spannungs-Dehnungskurven können drei wichtige Materialklassen unterschieden werden:

- **Spröde Materialien: Keramiken, Ionenkristalle, Gläser, kovalente Kristalle, intermetallische Phasen, "harte" Kunststoffe bzw. Polymere**
- **Duktile Materialien: Metalle, kovalente und Ionenkristalle bei hohen Temperauren, spezielle Polymere**
- **Elastomere: Gummi, viele Polymere**

Spröde Materialien

Spannungs-Dehnungskurve:



Kennzeichen:

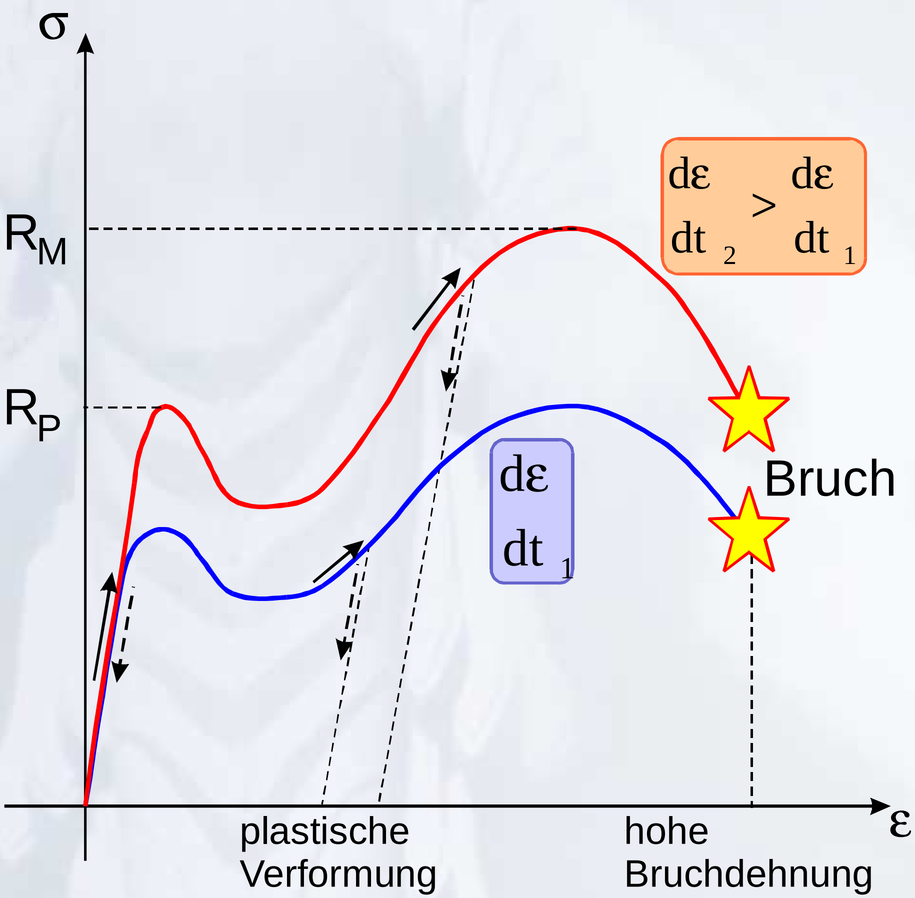
- **Geringe Bruchdehnung (<1%)**
- **Hohe Bruchspannug (hoher E-Modul)**
- **Geringe Bruchzähigkeit G_C**

$$G_C = \frac{1}{V} \cdot \int_{l_0}^{l_{Bruch}} F \cdot dl = \int_{0}^{\varepsilon l_{Bruch}} \sigma \cdot d\varepsilon$$

$$\boxed{G_C = \frac{E \cdot \varepsilon_{Bruch}^2}{2} = \frac{\sigma_{Bruch}^2}{2 \cdot E}}$$

Duktile Materialien

Spannungs-Dehnungskurve:

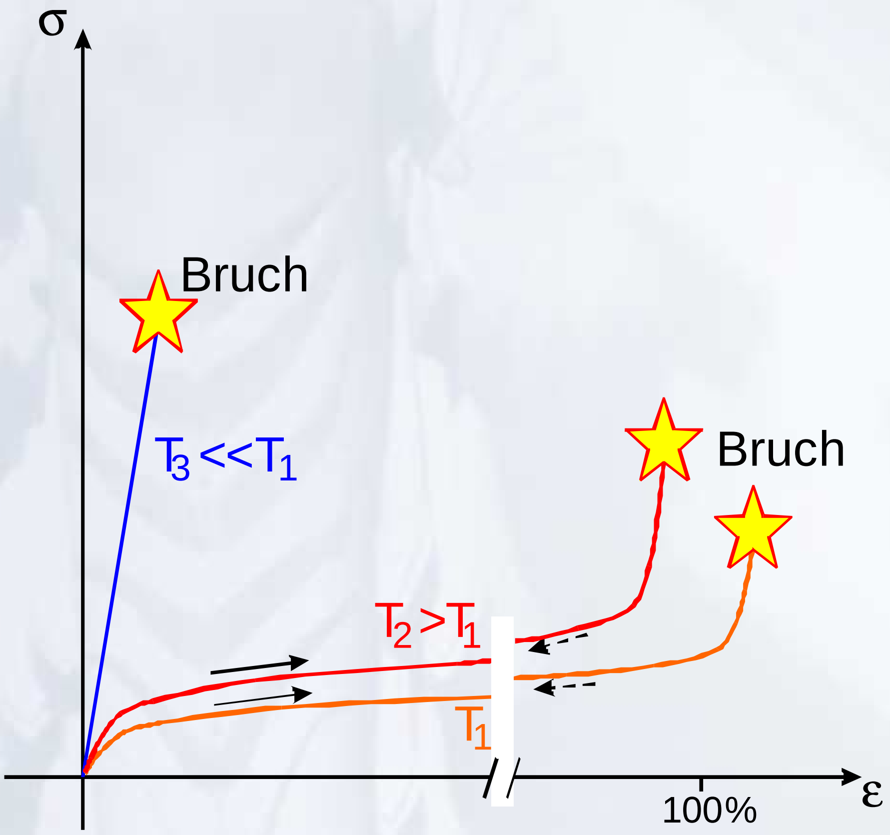


Kennzeichen:

- **Hohe Bruchdehnung**
- **Parameterabhängigkeit:**
  Einfluss von T,
  Einfluss der Verformungs-rate dε/dt
- **Hohe Bruchzähigkeit G_C:**
  Grosse Fläche unter der SpannungsDehnungs-Kurve
- **Irreversible Restverformung:**
  Hysterese bei Verformung ausserhalb des elastischen Bereiches

Elastomere

Spannungs-Dehnungskurve:

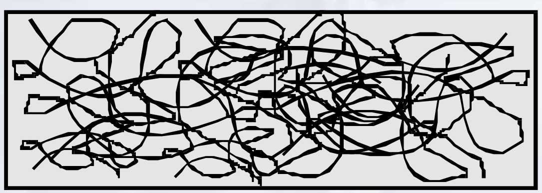


Kennzeichen:

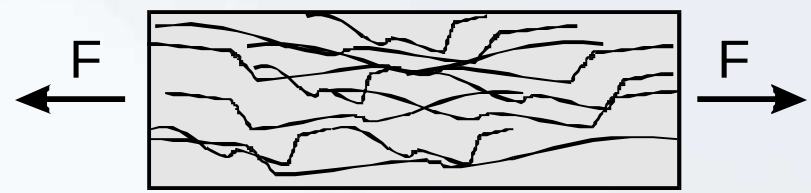
- **Extreme Bruchdehnung (>100%)**
- **Geringer E-Modul**
- **Parameterabhängigkeit: Starker einfluss von T**
- **keine irreversible Restverformung: Material immer im elastischen Bereich**

Verformungsmechanismus der Elastomere

Elastomere sind Polymere, d. h. kettenförmige Moleküle, welche im unbelasteten Zustand keine Vorzugsrichtung aufweisen. Im Belasteten Zustand beginnen sich die Moleküle zu strecken und parallel auszurichten:



Unbelasteter Zustand



Belasteter Zustand

Es werden keine atomare Bindungen beeinflusst, sondern es müssen nur relativ geringe Kräfte aufgewendet werden, um die Moleküle zu strecken. Daraus resultieren die hohen reversiblen Verformbarkeiten sowie die geringen E-Module.

Zusammenfassung nicht-elastische Effekte

- Verschiedene Spannungs-Dehnungs-Kurven definieren spröde und duktile Materialien sowie Elastomere.
- Vor dem Bruch sind spröde und Materialien sowie Elastomere reversibel verformbar.
- Duktile Materialien weisen große Bereiche in der Spannungs-Dehnungs-Kurve auf, in denen es zu irreversiblen, plastischen Verformungen kommt.
- Gleiche Materialien können bei unterschiedlichen Verformungsparametern unterschiedliche Spannungs-Dehnungs-Kurven aufweisen.

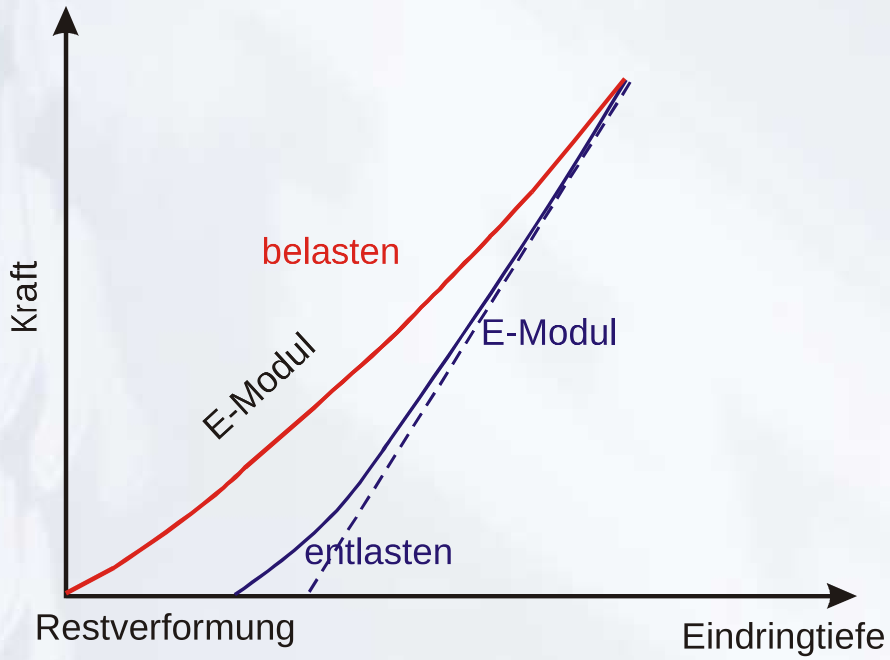
Messung mechanischer Eigenschaften

Die mechanischen Eigenschaften von Festkörpern können mit einer Vielzahl verschiedener Mess-verfahren bestimmt werden:

- Zugversuch (bereits behandelt)
- Eindringen eines Prüfkörpers
- Kratz- oder Ritztest
- Kraftspektroskopie
- Anregung von Schallwellen
- Röntgenographische Spannungsmessung

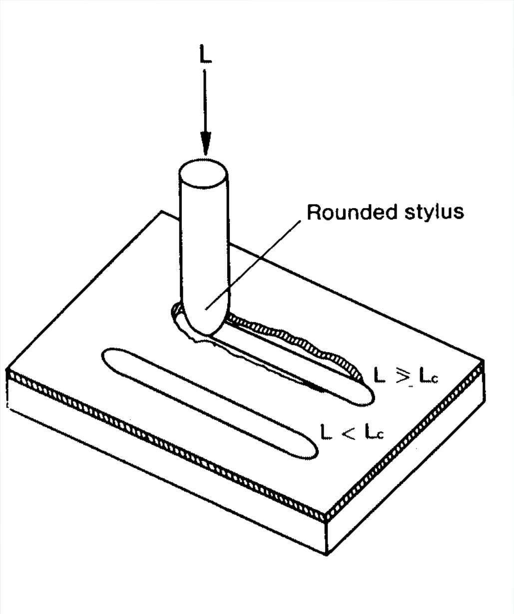
Eindringen eines Prüfkörpers

Ein möglichst unverformbarer Prüfkörper bekannter Geometrie dringt in ein Material ein. Man erhält eine Kraft-Eindringkurve (engl.: "Force Distance-Curve") aus welcher E-Modul und Restverformung bestimmt werden können.



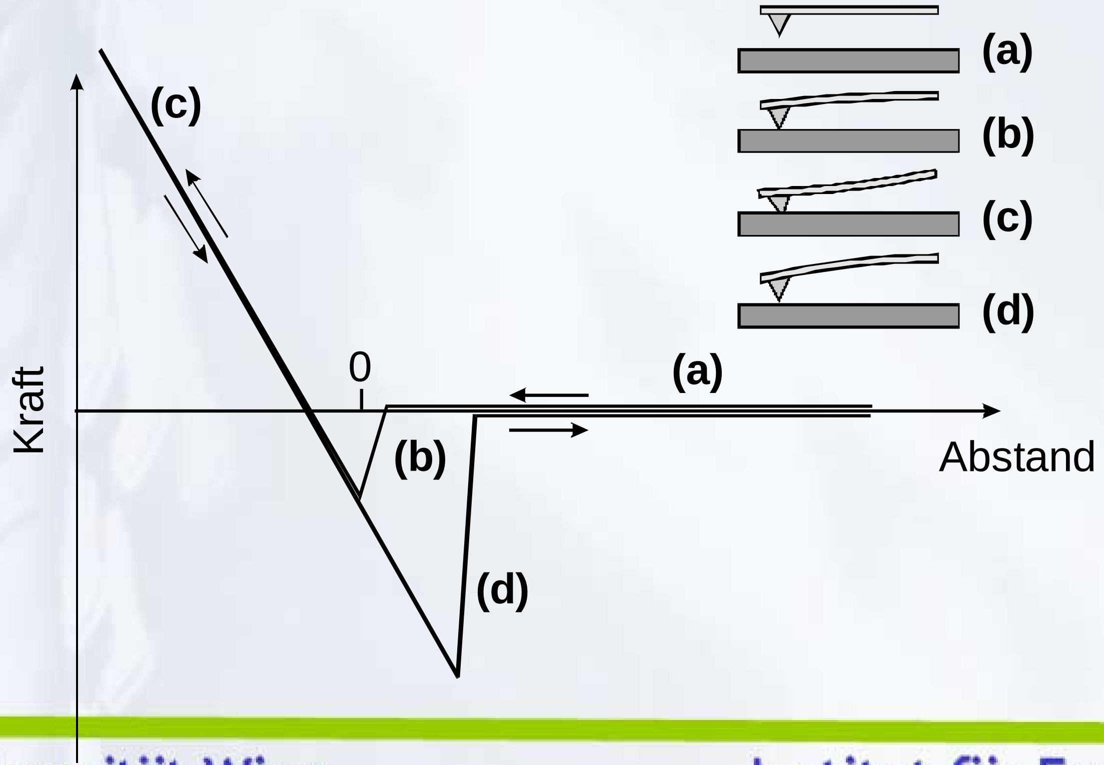
Kratz- oder Ritztest

Ein Stylus wird mit wird mit einer wachsenden Normalkraft beaufschlagt, bis er in die Festkörperoberfläche eindringt. Akustische Emissionen werden detektiert und liefern Informationen z. B. über Rissbildung und damit z. B. die Bruchzähigkeit des Materiales.



Kraftspektroskopie

In einem Rasterkraftmikroskop wird eine Spitze in periodischen Kontakt mit einer Oberfläche gebracht. Man erhält eine sogenannte Kraft-Abstandskurve, welche Informationen über die Wechselwirkung der Spitze mit der Oberfläche bzw. über E-Modul, Verformbarkeit und Fliessverhalten der Probe beinhaltet.



Anregung von Schallwellen

Die Schallgeschwindigkeit in einem Festkörper hängt direkt von den elastischen Konstanten im Elastizitätstensor ab. Die Anregung von longitudinalen oder transversalen Schwingungen ermöglicht die Messung der im Elastizitätstensor vorhandenen Koeffizienten über die Ausbreitungsgeschwindigkeit der einzelnen Moden.

Röntgenographische Spannungsmessung

Gitterkonstanten und Kristallgeometrien können mittels Röntgenbeugung (XRD) sehr genau bestimmt werden. Es ist daher möglich, auch Gitter-verzerrungen sehr exakt zu messen. Aus der Verformung der Elementarzelle kann dann bei bei bekanntem Elastititätstensor auf die im Festkörper vorhandenen Spannungen zurückgerechnet werden.