3 Das Bindungspotential und einige physikalische Eigenschaften

Die Bindungskräfte zwischen den Ionen oder Atomen in einem Festkörper bestimmen viele seiner physikalischen Eigenschaften. Intuitive sehen wir schnell ein, daß eine starke Bindung zwischen den atomaren Bausteinen auch einen hohen Schmelzpunkt und einen hohen Elastizitätsmodul zur Folge hat. Wir werden auch sehen, daß seine theoretische Festigkeit und Oberflächenenergie zunehmen mit gleichzeitig abnehmender thermischer Ausdehnung. In diesem Kapitel lernen wir den qualitativen Zusammenhang zwischen der Tiefe des Bindungspotentials und diesen Eigenschaften.

3.1 Der Schmelzpunkt

Ionische Verbindungen

Schmelzen, verdampfen und sublimieren geschieht wenn genügend thermische Energie einem Kristall zugeführt wird um die potentielle Energie die die Bausteine zusammenhält zu überwinden.

Die Erfahrung zeigt, daß ein reines, einphasiges Material bei einem konstanten Druck bei einer bestimmten Temperatur schmilzt unter Aufnahme von Wärme (Energie). Die aufgenommene Wärme wird die Schmelzwärme genannt, ΔH_f. Sie ist die Energie die für die Reaktion

fest $\rightarrow$ flüssig

notwendig ist.

ΔH_f ist ein Maß für die Enthalpiedifferenz zwischen dem festen und flüssigen Zustand bei der Schmelztemperatur. Ähnlich ist die Schmelzentropie ΔS_f definiert:

$$\Delta S_f = \frac{\Delta H_f}{T_m} \qquad \text{Gl.: 3-1}$$

mit T_m dem Schmelzpunkt in Kelvin. Der Entropieunterschied ist ein direktes Maß für die Unordnung die durch den Schmelzvorgang in das Material

eingebracht wird und ist natürlich positiv (nimmt zu), da der flüssige Zustand immer weniger geordnet ist als der feste Zustand. Die Schmelzpunkte und Schmelzentropien einiger keramischer Werkstoffe zeigen, daß diese höhere Schmelzpunkte als Metalle und Polymere haben.

Verbindung	Schmelzpunkt °C	Schmelzentropie J/mol °c	Verbindung	Schmelzpunkt °C	Schmelzentropie J/mol °c
Oxide					
Al_2O_3	2054	47.70	Mullit ($2Al_2O_3 \times 2SiO_2$)	1850	
BaO	2013	25.80	Na_2O	1132	33.90
BeO	2780	30.54	NbO_5	1512	58.40
Bi_2O_3	825		Sc_2O_3	2375	
CaO	2927	24.80	SrO	2665	25.60
Cr_2O_3	2330	49.80	Ta_2O_5	1875	
Eu_2O_3	2175		ThO_2	3275	
Fe_2O_3			TiO_2	1857	31.50
Fe_3O_4	1597	73.80	UO_2	2825	
Li_2O	1570	32.00	V_2O_5	2067	
Li_2ZrO_3	1610		Y_2O_3	2403	38.70
Ln_2O_3	2325		ZnO	1975	
MgO	2852	25.80	ZrO_2	2677	29.50
Halogenide					
AgBr	434		LiBr	550	
AgCl	455		LiCl	610	22.60
CaF_2	1423		LiF	848	
CsCl	645	22.17	LiI	449	
KbR	730		NaCl	800	25.90
KCl	776	25.20	NaF	997	
KF	880		RbCl	722	23.85
Silikate und Glasbildner					
B_2O_3	450	33.20	$Na_2Si_2O_5$	874	31.00
$CaSiO_3$	1544	31.00	Na_2SiO_3	1088	38.50
GeO_2	1116		P_2O_5	569	
$MgSiO_3$	1577	40.70	SiO_2 (Quarz)	1423	4.60
Mg_2SiO_4	1898	32.76			
Karbide, Nitride, Boride und Silizide					
B_4C	2470	38.00	ThN	2820	
HfB_2	2900		TiB_2	2897	

HfC	3900	TiC	3070
HfN	3390	TiN	2947
HfSi	2100	TiSi2	1540
MoSi2	2030	UC	2525
NbC	3615	UN	2830
NbN	2204	VB2	2450
SiC	2837	VC	2650
Si3N4	bei 2151 K ist der N2 Partial druck 1 atm	VN	2177
		WC	2775
		ZrB2	3038
TaB2	3150	ZrC	3420
TaC	3985	ZrN	2980
TaSi2	2400	ZrSi2	1700
ThC	2625		

Tabelle 3-1: Schmelzpunkte und Schmelzentropie einiger anorganischer Werkstoffe

3.1.1 Die Größen die den Schmelzpunkt und Schmelzentropie von ionisch gebundenen Verbindungen beeinflussen.

Die Größen die den Schmelzpunkt und Schmelzentropie beeinflussen sind die Bindungsstärke und der kovalente Charakter der Bindung.

Die Bindungsstärke

Die Wertigkeit und die Ionenradien (Gitterabstand).

Der wichtigste Faktor der den Schmelzpunkt beeinflußt ist die Bindungsstärke. Die Energie in der Potentialgleichung der ionischen Bindung ist zusammengesetzt aus anziehendem Coulomb - Potential und abstoßendem Born- Potential ($E_{rep}= B/r^n$). Die Nettoenergie ist E_{net}:

$$E_{net} = -\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{B}{r^n} \qquad \text{Gl.: 3-2}$$

Die Bindungsstärke (die Tiefe dieses Potentialtopfes bis zum Wendepunkt, siehe Bild 3-3) wird durch die Suche des Minimums und des dazugehörigen Gleichgewichtsabstandes r_o erhalten. Sie ist gegeben durch:

$$E_{pot} = -\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1-\frac{1}{n}\right) \qquad \text{Gl.: 3-3}$$

Die Stärke einer ionischen Bindung ist also proportional zum Produkt der Ladungen z_1 und z_2 und umgekehrt proportional zum Gleichgewichtsabstand. Je größer die Wertigkeit desto stärker ist also diese Bindung. Z. B. kristallisieren beide Verbindungen MgO und NaCl in der Steinsalzstruktur, ihre Schmelzpunkte sind aber mit 2852 und 800 °C sehr unterschiedlich. Der hohe Schmelzpunkt von MgO ist direkt verursacht durch die zweifache Wertigkeit des Kations. Der Potentialtopf von MgO ist etwa 4 mal tiefer als derjenige von NaCl. Es ist daher nicht erstaunlich, daß MgO sehr viel mehr Energie zum schmelzen benötigt als NaCl.

Auch nimmt der Schmelzpunkt zu mit kleiner werdendem Abstand der Ionen im Gitter.

	Ionenabstand [Å]	Schmelzpunkt [°C]
NaF	2.31	988
NaCl	2.81	801
NaBr	2.98	755
NaI	3.23	651
MgO	2.1	2800
CaO	2.4	2580
SrO	2.57	2430
BaO	2.76	1923
LiF	2.01	824
NaF	2.311	988
KF	2.67	846
RbF	2.82	775

Tabelle 3-2: Ionenabstände & Schmelzpunkte einiger anorganischer Verbindungen.

Diese Regeln gelten nur wenn die Ionen als starre, geladene Kugeln angenähert werden können. Dies ist nicht immer der Fall. Wird die Elektronenverteilung etwas komplexer, und liegt damit keine rein ionische Bindung mehr vor, dann gibt es Abweichungen von diesen einfachen Zusammenhängen.

3.1.2 *Der kovalente Charakter der Bindung:*

Nach Gl.: 3-1 ist der Schmelzpunkt proportional zur Schmelzenthalpie ΔH_f . Wie wir sehen werden *reduziert ein zunehmender kovalenter Bindungscharakter die Schmelzenthalpie* ΔH_f um andererseits diskrete Strukturbausteine zu stabilisieren, was wiederum die Anzahl der Bindungen reduziert die beim schmelzen aufgebrochen werden müssen. Dies äußert sich in einem niedrigeren Schmelzpunkt als für das starre Kugelmodell zu erwarten ist. Ein größerer kovalenter Bindungscharakter allein sagt an sich noch nichts über einen höheren oder tieferen Schmelzpunkt aus. Die wichtige Größe ist die Struktur der Bausteine in der Schmelze. Erst wenn die kovalenten Bindungen zum schmelzen aufgebrochen werden müssen, resultiert ein hoher Schmelzpunkt. Dies ist nicht immer der Fall[1].

Den Einfluß des kovalenten Bindungscharakters in drei MX_2 Verbindungen wird in Bild 3-1 illustriert.

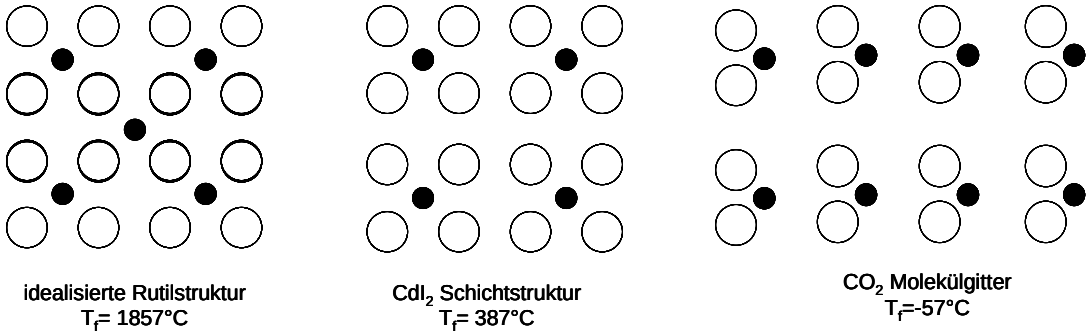

Bild 3-1. Einfluss der Polarisation auf die Struktur und den Schmelzpunkt

Der kovalente Bindungscharakter nimmt von links nach rechts zu. Hierbei nimmt der dreidimensionale Charakter der Bindung von TiO_2 (Rutil) über die Schichtstruktur von CdI_2 zu, bis zum Molekülgitter des CO_2 wie auch die Schmelzpunkte in dieser Reihenfolge abnehmen. Früher (in Einführung in die

[1] Ein extremes Beispiel sind die Polymere. Hier sind die Bindungen innerhalb der Kette sehr stark, diejenigen zwischen den Ketten sehr schwach. Die Schmelzpunkte von Polymeren sind sehr niedrig. Die starke Bindungen innerhalb der Polymermoleküle werden beim schmelzen nicht gebrochen, sondern nur die schwachen Bindungen zwischen den Polymerketten.

Materialwissenschaft) haben wir angenommen, daß entweder reine ionische Bindung oder reine kovalente Bindung in einer Verbindung vorliegen. Jetzt sehen wir, daß es etwas komplexer ist und beide Bindungsarten vorliegen können, und dies in unterschiedlichen Untereinheiten der Verbindung. Historisch wurde dieses Problem auf zwei Wege gelöst. Einmal nahm man an, daß die Bindung rein kovalent ist und man hat eine Verschiebung der Elektronenwolke zum mehr elekrtonegativeren Ion eingeführt.

Der andere Weg ist, daß man eine reine ionische Bindung annimmt und dann ihr einen kovalenten Anteil zuschreibt. Den letzteren Ansatz verfolgen wir hier kurz wie in Bild 3-2 skizziert. In Bild 3-2a.) ist eine reine ionische Bindung gezeigt. In Bild 3-2 b) wird etwas kovalenter Bindungscharakter eingebracht durch die Verschiebung der Elektronenwolke des mehr polarisierbaren Anions zum polarisierenden Kation. In Bild 3-2c.) ist die Situation für eine starke kovalente Bindung gezeigt.

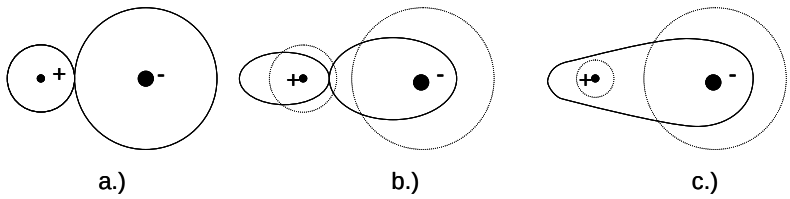

Bild 3-2 Effekt der Polarisierung. a.) Ideale ionische Bindung ohne Polarisierung. b.) Polarisiertes Ionenpaar. c.) Ausreichende Polarisierung um eine kovalente Bindung zu bilden.

Das Ausmaß wie die Elektronenwolke von beiden Ionen gleichermaßen beansprucht wird ist also ein Maß für den kovalenten Bindungscharakter. Er ist durch drei Größen bestimmt:

1.) Die "Polarisierungskraft" des Kations.

Sie ist groß für stark geladene Kationen (z. B. Al^{3+}) und kann über das Ionenpotential Φ abgeschätzt werden:

$$\Phi = \frac{z+}{r} \qquad \text{Gl.: 3-4}$$

Hierbei ist *z* die Ladung des Kations und *r* sein Radius. Die Ionenstärken einiger Kationen sind in Tabelle 3-3 aufgelistet. Hohe Ladung und kleiner Radius sorgen für eine große Ionenstärke und daher führen diese auch zu erhöhtem kovalenten Bindungscharakter.

Li^+	17	Be^{2+}	64.0	B^{3+}	150.0
Na^+	10.5	Mg^{2+}	31.0	Al^{3+}	60.0
K^+	7.0	Ca^{2+}	20.0	Si^{4+}	100.0

Tabelle 3-3: Ionenpotentiale einiger Kationen, (1/nm).

Aufgrund der Wertigkeit alleine würde man nun annehmen, daß der Schmelzpunkt von Al_2O_3 (+3, -2) höher ist als der von MgO (+2,-2), obwohl es umgekehrt ist. Aufgrund der hohen relativen Polarisierungsstärke von Al^{3+} im Vergleich zu Mg^{2+} ist es klar, daß der kovalente Charakter der Al-O Bindung größer ist als dieser der Bindung in MgO. Dieser größere kovalente Bindungscharakter in Al_2O_3 stabilisiert diskrete Strukturelemente in der Schmelze und senkt den Schmelzpunkt ab. Ein weiterer Hinweis auf eine "Struktur" in der Schmelze ist die Schmelzentropie ΔS_f pro Ion von Al_2O_3, die mit 9.45 J/molK kleiner ist als die von MgO mit 12.9 J/mol·K.

2.) Die Polarisierbarkeit des Anions.

Sie ist ein Maß wie leicht die Elektronenwolke des Anions durch das Kation weggezogen werden kann. Sie skaliert mit der dritten Potenz des Ions (also mit seinem Volumen). Eine zunehmende Polarisierbarkeit des Anions führt daher zu mehr kovalentem Bindungscharakter, was wieder zu einem tieferen Schmelzpunkt führt. Z. B. sind die Schmelzpunkte von LCl, LiBr und LiI 613, 547 und 446°C.

3.) Die Elektronenkonfiguration des Kations

Die d- Elektronen schirmen weniger effektiv die Kernladung ab als die s- oder p-Elektronen. Ionen mit d- Elektronen haben eine größere Tendenz kovalente Bindungen zu bilden. Z. B., Ca^{2+} und Hg^{2+} haben vergleichbare Radien (114 und 116 pm) und trotzdem haben Hg Salze niedrigere Schmelzpunkte als Ca Salze. $HgCl_2$ schmilzt bei 276°C und $CaCl_2$ bei 782 °C.

3.2 Überwiegend kovalent gebundene Keramiken

Bisher hatten wir die Beziehung der interatomaren Kräfte und der Schmelzpunkte vornehmlich ionisch gebundener Keramiken angeschaut.

Die Bindungskräfte von vornehmlich kovalent gebundenen Keramiken sind sehr gross und die Schmelzpunkte relativ hoch. Vertreter dieser Art sind SiC, Si_3N_4 Oxikarbide und Oxinitride. Einige haben gar keine Schmelzpunkte sondern zersetzen sich bei hohen Temperaturen.

3.3 Der thermische Ausdehnungskoeffizient.

Der thermische Ausdehnungskoeffizient ist definiert als die relative Längenänderung α einer Probe der Länge l_o mit Erhöhung der Temperatur T:

$$\alpha = \frac{1}{l_0}\left(\frac{\partial l}{\partial T}\right)_p \qquad \text{Gl.: 3-5}$$

Die thermische Längenausdehnung beruht direkt auf der anharmonischen Form des Bindungspotentials. Das Potential ist in Bild 3-3 gezeigt.

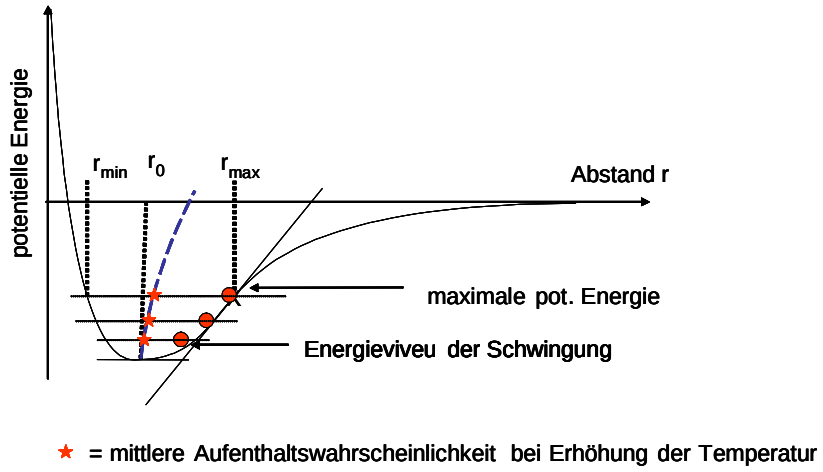

Bild 3-3: Potentialtopf und mittlere Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Ions bei Erhöhung der Temperatur (Sterne).

Allgemein gilt, daß die Asymmetrie des Potentialtopfes abnimmt mit zunehmender Tiefe des potentialtopfes, also größer werdender Bindungsstärke. Demnach müßte die thermische Dehnung umgekehrt proportional zur Bindungsstärke skalieren oder zum Schmelzpunkt. Die meisten Ausdehnungskoeffezienten von Keramiken liegen zwischen 3 und $10x10^{-6}$ $°C^{-1}$, sind also klein im Vergleich zu den Werten der Metalle.

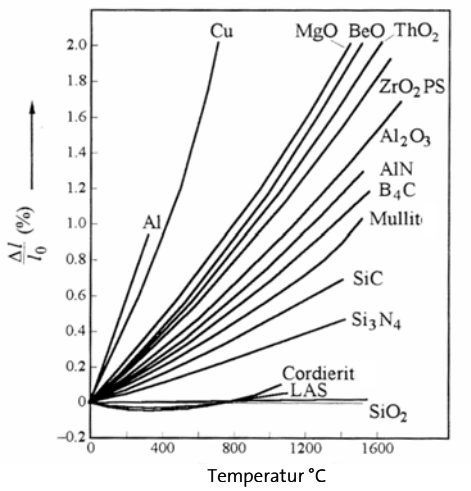

Bild 3-4: Thermische Ausdehnung einiger keramischer Werkstoffe

1.) Die thermische Längenänderung einiger keramischer Werkstoffe ist in Bild 3-4 gezeigt.

2.) Keramiken haben allgemein kleine Ausdehnungskoeffizienten

3.) Der Ausdehnungskoeffizienten nehmen mit zunehmender Temperatur zu, da der Potentialtopf mit höherer Temperatur immer asymmetrischer wird.

4.) Kovalent gebundenen Verbindungen wie SiC und Si_3N_4 die locker gepackt sind haben kleinere Ausdehnungskoeffizienten als die dichteren gepackten ionisch gebundenen Verbindungen. Bei diesen wirken sich alle Vibrationen der Ionen in einer Längenzunahme aus. In den locker gepackten Verbindungen hingegen können sich auch Bindungswinkel mit zunehmender Temperatur ändern ohne daß die Bindungsabstände sich stark ändern. Ein wichtiger Vertreter ist SiO_2 das in seiner glasigen Form eine sehr niedere thermische Dehnung hat im Vergleich zu seiner kristallinen Form. Im Glasnetzwerk können sehr einfach Biegeschwingungen der Bindungen auftreten.

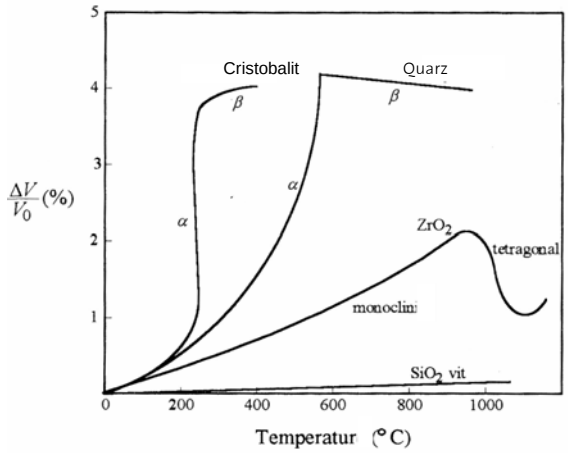

Bild 3-5: Thermische Dehnung von SiO2 Glas (SiO2 vit.) und Cristobalit und Quarz. Die abrupten Volumenänderungen sind von Phasenübergängen verursacht, wie auch im ZrO2

5.) Einige Keramiken haben sehr anisotrope thermische Ausdehnungskoeffizienten in den unterschiedlichen kristallographischen Richtungen der Einheitszelle. Ein typischer Vertreter ist Kordierit und Lithium-Aluminium-Silikat. Letztere Verbindung hat über einen großen Temperaturbereich fast keine Ausdehnung da es sich in einer Richtung zusammenzieht und in der anderen Richtung ausdehnt.

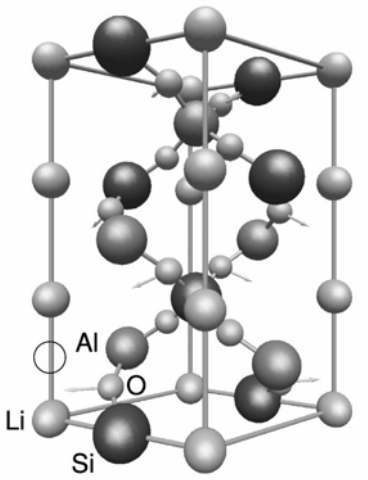

Bild 3-6: Einheitszelle des hexagonalen β-Eukryptits (LiAlSiO4).
Dies ist eine "gemittelte" Struktur. Die Gittereigenschwingungen machen besitzen Biegemoden. Der Kreis zeig wohin sich das Sauerstoffion über eine Biegung der Bindung positionieren kann.[2]

Dieser Effekt kommt bei vielen Alumino-Silikaten vor wie auch bei einigen Verbindungen wie ZrW_2O_8.

Der lineare Ausdehnungskoeffizient ist bei β - LiAlSiO4 : $\alpha_a = \alpha_b \approx 7.5 \cdot 10^{-6}$ °C^{-1} und $\alpha_c \approx -16 \cdot 10^{-6}$ °C^{-1} und dadurch die Volumenänderung $\alpha_V \approx 0$ von Raumtemperatur bis 1 000°C. Trotzdem dehnen sich die einzelnen Körner im Material in einer Richtung aus und ziehen sich in der anderen zusammen. Wenn wir uns das Gefüge schematisch wie in Bild 3-7 gezeigt ist darstellen, wo sich alle Körner in der Längsrichtung berühren und in der Querrichtung frei bewegen können, so sehen wir, dass die gesamte Volumendehnung wohl null ist. Die absolute Verschiebung der Körner ist aber recht gross, wenn die Körner 50 μm gross sind, die Bindungen müssten sich dann um 40 Å dehnen. Diese Verformung würde keine Bindung mitmachen und der Körper würde zu Pulver zerfallen. Sind aber die Körner 50 nm klein (≅ etwa 50-100 Einheitszellen), so ist die Dehnung nur 0.4

[2] PHYSICAL REVIEW B 1 SEPTEMBER 1998-II VOLUME 58, NUMBER 10, p 6219-6223, A. I. Lichtenstein and R. O. Jones, H. Xu and P. J. Heaney

Å. Dies ist relativ klein gegenüber der Bindungslänge und kann noch von der Bindung noch toleriert werden ohne zu brechen.

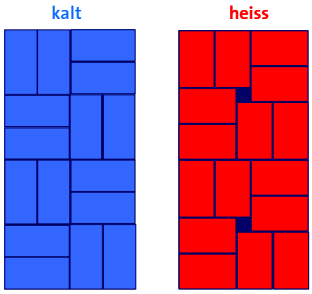

Bild 3-7: Einfaches Modell des Gefüges von einem Werkstoff mit positivem und negativen thermischer Dehnung in zwei Richtungen der Einheitszelle. Bei grossen Körnern (50 µm) übersteigt der "Versatz" der Bindungen die kritische Dehnung der Bindung. Bei kleinen Körnern (50 nm) kann diese Dehnung noch ohne Zerstörung der Bindung aufgenommen werden und das Material desintegriert nicht.

Eine Kompensation der Gitterdehnungen ist nur möglich da die Kristallite sehr klein sind und damit die Dehnungen die kritische Bruchdehnung der Bindungen nicht übersteigt.

3.4 Der Elastizitäsmodul von Werkstoffen.

Wie wir gesehen haben, sind die Bindungspotentiale ionischer und kovalenter Verbindungen sehr tief. Hieraus resultieren nicht nur hohe Schmelzpunkte sondern diese Werkstoffe sollten auch sehr steif und fest sein. In diesem Abschnitt wollen wir versuchen aus dem Bindungspotential den Elastizitätsmodul und die Zugfestigkeit spröder Werkstoffe abzuschätzen. Aus der Potentialgleichung Gl.: 3-2 erhalten wir die Kraft - Abstandskurve durch Ableitung des Potentials nach dem Ort zu:

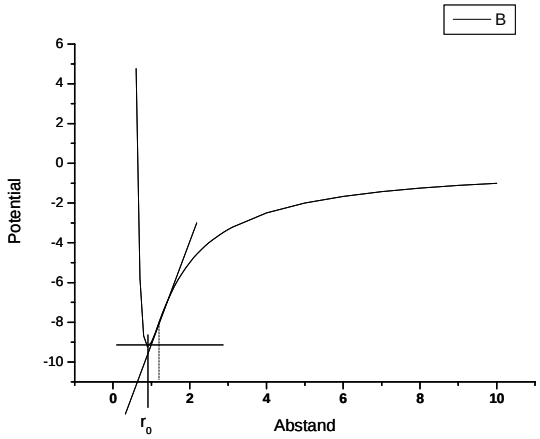

Bild 3-8: Potential-Abstandskurve von Gl.: 3-2 mit ro dem Gleichgewichtsabstand

Die Ableitung ist:

$$F(r) = \partial E_{net} / \partial r = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} \qquad \text{Gl.: 3-6}$$

Wird ein Ion aus seiner Gleichgewichtslage zu größeren Abständen hin ausgelenkt, dann erfährt es eine Rückstellkraft. Sie ist in erster Näherung proportional zur Auslenkung (Tangente an die Kurve durch den Punkt $x=r_o$). Sie wird größer mit größerer Auslenkung bis zu einem Maximum (Maximum der Kraftkurve; entspricht dem Wendepunkt in der Potentialkurve). Dann bricht die Bindung auseinander. Ihren maximalen Wert hat die Rückstellkraft wenn die Potentialkurve ihren Wendepunkt hat.

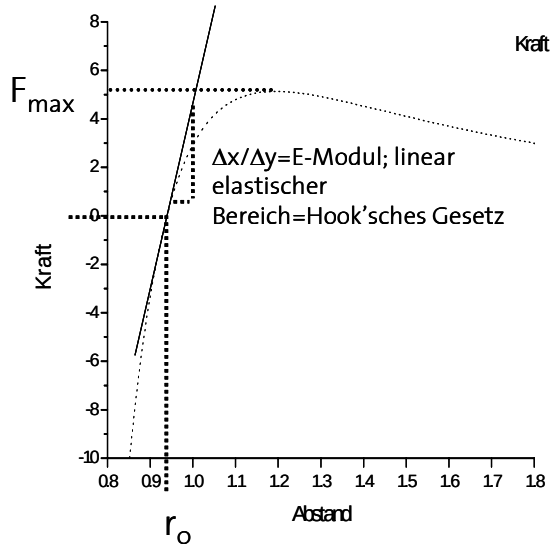

Bild 3-9: Die Kraft - Abstandskurve. Im Gleichgewichtspunkt r_o liegt die Tangente die in erster Nährung das linear elastische Verhalten von Festkörper unter Zugbelastung beschreibt.

Diese Beschreibung entspricht der Erfahrung, dass die Kraft zur Dehnung eines Festkörper proportional zur Dehnung ist., also das Hook`sche Gesetz gilt:

$$\sigma = E\varepsilon \qquad \text{Gl.: 3-7}$$

mit σ der mechanischen Spannung, ε der Dehnung ($\varepsilon=(L-L_o)/L_o$) und E dem Elastizitätsmodul. Die Kraft folgt dann aus Bild 3-9 und ist in der Nähe von r_o dann:

$$F = S_0(r - r_0) \qquad \text{Gl.: 3-8}$$

wobei S_o dann die Steifigkeit der Bindung ist:

$$S_0 = \left(\frac{\partial F}{\partial r}\right)_{r=r_0} \qquad \text{Gl.: 3-9}$$

Wenn wir jetzt die Kraft aus Gl.: 3-8 durch den Querschnitt dividieren, der proportional r_o^2 ist, bekommen wir die Spannung die auf eine Bindung wirkt, wobei die Auslenkung der Bindung gerade $(r-r_o)/r_o$ ist. Vergleichen wir das Ergebnis mit Gl.: 3-7 erhalten wir:

$$E \approx \frac{S_0}{r_o} \qquad \text{Gl.: 3-10}$$

mit Gl.: 3-6 und Gl.: 3-9 erhalten wir dann:

$$E = \frac{1}{r_0}\left(\frac{\partial F}{\partial r}\right)_{r=r_0} = \frac{1}{r_0}\left(\frac{\partial^2 E_{net}}{\partial r^2}\right)_{r=r_0} \qquad \text{Gl.: 3-11}$$

Die Steifigkeit (der E-Modul) eines Festkörpers ist direkt proportional zur Krümmung seiner Energie-Abstands Kurve ist. Körper mit festerer Bindungen sind steifer als schwache. Die Verbindungen mit hohen Schmelzpunkten (tiefen Potentialtopf) sehr steif , haben einen hohen E- Modul.

3.5 Die theoretische Festigkeit von Festkörpern

Wir schätzen nun die Festigkeit aus der Potentialkurve ab.

Die meisten Bindungen im Festkörper brechen bei etwa 25% Dehnung, also bei $1.25r_o$. Aus Bild 3-9 folgt für die maximalle Auslenkung die eine Bindung aushalten kann:

$$S_0 \approx \frac{2F_{\max}}{r_{Bruch} - r_0} \approx \frac{2F_{\max}}{1.25r_0 - r_0} \qquad \text{Gl.: 3-12}$$

Dividieren wir beide Seiten mit r_o und setzen ein $\frac{F_{\max}}{r_0^2} \approx \sigma_{\max}$, dann folgt für die Spannung:

$$\sigma_{\max} \approx \frac{E}{8} \qquad \text{Bild 3-10}$$

Für eine genauere Rechnung beginnt man mit der Kraft-Abstandskurve und erhält dann:

$$\sigma_{\max} = \frac{E}{\left[(n+1)/(m+1)\right]^{(m+1)/(n-m)}}\left(\frac{1}{n+1}\right) \qquad \text{Gl.: 3-13}$$

werden typische werte für n=9 und m=1 eingesetzt, dann erhalten wir für eine ionische Bindung:

$$\sigma_{max} \approx \frac{E}{15} \qquad \text{Gl.: 3-14}$$

Die Zerreißfestigkeit ionisch gebundener Festkörper sollte also zwischen 1/8 und 1/15 des E- Moduls sein. Tatsächlich finden wir aber eher, daß die Bruchfestigkeit dieser Werkstoffe bei 1/100E bis 1/1000 E liegen, also viel tiefer als aus der Potentialkurve abgeschätzt. Offensichtlich sind die Spannungen lokal in einem Festkörper nicht gleich denen die makroskopisch angelegt werden. Wir werden später sehen, daß aufgrund der Gefügeeinflüsse Spannungsüberhöhung an Fehlern im Gefüge vorliegen die in dieser Größenordung sind die wir hier abgeschätzt haben, auch wenn wir makroskopisch viel kleiner Spannungen an den Festkörper anlegen.

3.6 Zusammenfassung.

1.) Die Bindungskraft zwischen den Atomen bestimmen viele Eigenschaften eines Festkörpers wie den Schmelzpunkt, die thermische Dehnung und die theoretische Festigkeit.

2.) Je stärker die Bindung desto höher der Schmelzpunkt. Kovalenter Bindungscharakter wird aber diskrete Strukturelemente in der Schmelze stabilisieren und den Schmelzpunkt senken.

3.) Die thermische Dehnung resultiert aus der anharmonischen Potentialkurve. Festkörper mit tiefer Potentialkurve haben kleine thermische Dehnung. In locker gepackten Strukturen können auch Biegeschwingungen aktiviert werden die ebenfalls zu kleinen thermischen Dehnungen führen.

4.) In erster Näherung ist die Steifigkeit eines Festkörpers proportional zur Krümmung der Potentialkurve. Generell sind fester gebundene Festkörper steifer als weniger fest gebundene.

5.) Die theoretische Festigkeit ionisch gebundener Festkörper ist etwa 1/10 des E-Moduls. Die tatsächlichen Festigkeiten von keramischen Werkstoffen ist jedoch nur 1/100 oder 1/1000 dieses Wertes.

LITERATURVERZEICHNIS

L. Van Vlack, Elements of Materials science and Engineering, 5th Edition, Addison-Wesley, Reading, Mass. 19985.

N.N. Greenwood, Ionic Crystals, Lattice Defects and Nonstochiometry, Butterwiorth, London, 1968. L.

Azaroff, Introduction to Solids, McGraw-Hill, N.Y. 1988.

C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 6th Ed. Wiley, N. Y. 19