

Theoretische Grundlagen

Festkörper und Elastizitätsmodul:

Festkörper weisen einen kristallinen (streng geordneten) oder amorphen (chaotischen) Aufbau auf. Bei kristallinen Festkörpern, gibt es 14 unterschiedliche Arten von Elementarzellen, Bravaisgitter genannt. Im Versuch sind nur kubische Kristallsysteme von Interesse.

Es kommen nur folgende Bravaisgitter in Frage:

1. einfach kubisch: nur jeweils ein Atom an allen Kristallgitterecken
2. kubisch raumzentriert: Atome befinden sich an allen Ecken und im Mittelpunkt vom Kubus
3. kubisch flächenzentriert: Atome befinden sich an allen Ecken und in den Mittelpunkten der begrenzenden Flächen.

Ein Festkörper kann die Gestalt ändern wenn äußere Kräfte auf ihn wirken.

Im Versuch wird die Dehnung und das dazugehörige Elastizitätsmodul untersucht.

Spannung und Dehnung verhalten sich innerhalb des Proportionalitätsbereichs linear.

Das entspricht dem Hooke'schen Gesetz.

$$\sigma = E \varepsilon$$

ε ... Dehnung

E ... Elastizitätsmodul

σ ... Spannung

Wenn keine äußeren Kräfte mehr auf den Körper einwirken, bilden sich die Verformungen wieder vollständig zurück.

Ab der Proportionalitätsgrenze bis zur Elastizitätsgrenze verhalten sich Spannung und Dehnung nicht linear. Eine Verformung kann nicht mehr vollständig zurückgehen.

Ab der Elastizitätsgrenze behält der Festkörper seine veränderte Form bei.

Mit konstanter Zuggeschwindigkeit v gilt für die Längenänderung Δl des Körpers $\Delta l = v t$ und für die Dehnung

$$\varepsilon = (v t)/L_0$$

L_0 ... eingespannte Länge zu Beginn des Versuchs

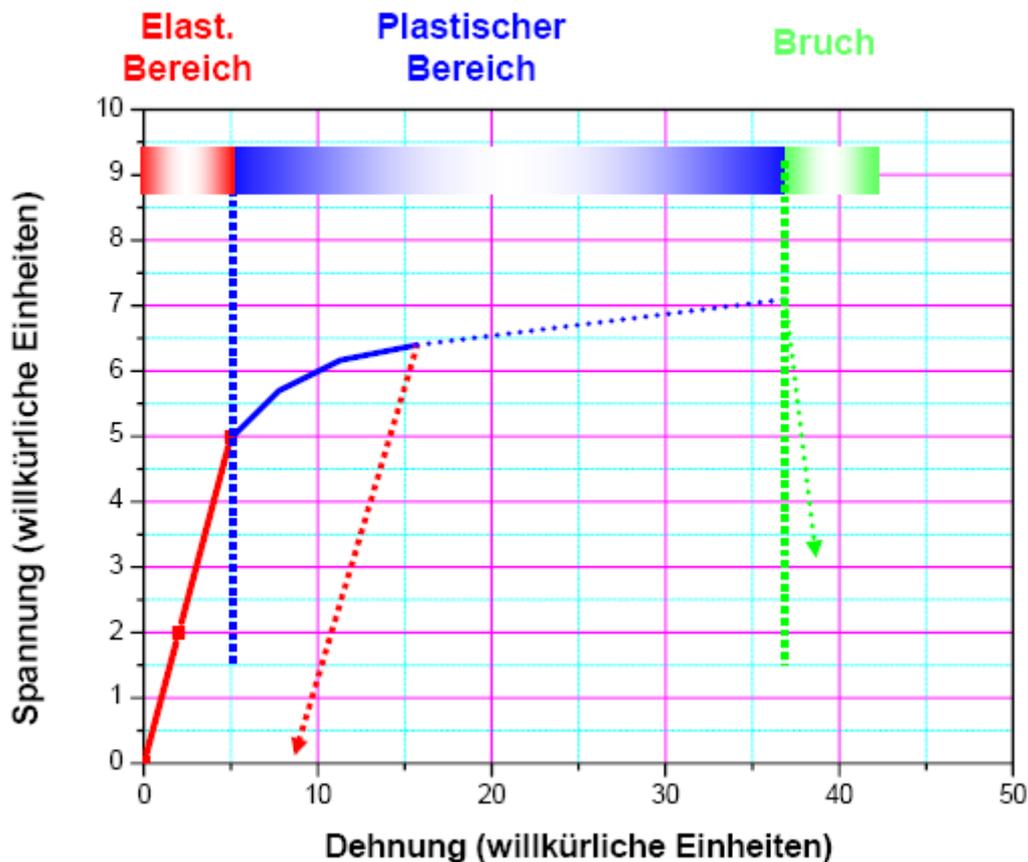
Die Zugspannung wird durch die gemessene Kraft F und den Körperquerschnitt q bestimmt:

$$\sigma = F/q$$

Unter Spannung verhält sich ein Festkörper bis zu einer gewissen Grenzspannung, dieser Wert wird dann als Elastizitätsgrenze bezeichnet, elastisch. Hier ist die Dehnung proportional zur Spannung über eine Konstante, namens Elastizitätsmodul ($\sigma = E * \epsilon$). Diese Gleichung wird als Hook'sches Gesetz bezeichnet und ist bei kleinen Spannung(also nur im elastischen Bereich) gültig. In der Verallgemeinerung kann man es auch in tensoreller Form schreiben, wo auch weiterhin ein linearer Zusammenhang besteht: $\sigma_{ij} = C_{ijkl} * \epsilon_{kl}$. Der Tensor C_{ijkl} der elastischen Konstanten besitzt 81 Komponenten von denen bei Flüssigkeiten nur 1 eine Komponente unabhängig ist, bei isotropen Materialien nur 2, doch bei Kristallen bis zu 21 Komponenten unabhängig sind. Da dieser Tensor symmetrisch ist können nicht mehr als 21 Komponenten unabhängig voneinander sein. Die elastischen Eigenschaften von Kristallen hängen von ihrer Gitterstruktur ab.

Steigt die Spannung über eine die Elastizitätsgrenze hinaus, dann verhält sich das Material plastisch. Abgesehen vom Übergangsbereich zwischen Plastizität und Elastizität ist die Dehnung eines sich plastisch verhaltenden Materials auch wieder linear zur Spannung, nur hier dehnt sich der Körper schon bei geringer Spannungszunahme stärker aus.

Irgendwann bei weiter zunehmender Spannung erreicht das Material dann seine maximale Belastbarkeit und es bricht spontan ab.



Der entscheidende Unterschied zwischen elastischer und plastischer Verformung ist, dass sich das Material solange es sich noch im elastischen Bereich befindet, sich nach dem Ende der Spannung wieder selbstständig zurückformt(Reversibilität), während dies im plastischen Bereich nicht mehr der Fall ist(irreversible Verformung).

Aus der Sicht der Quantenmechanik lassen sich alle physikalischen Eigenschaften von Festkörper aus Lösungen der Schrödingergleichung berechnen. Hier sind die Wellenfunktionen der Elementarteilchen im niedrigsten Energiezustand anzunehmen und man muss schließlich ein Vielteilchenproblem lösen. Es treten dabei Schwierigkeiten durch die die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf, da in diesen Größenordnungen neben der Coulomb-Kraft auch noch eine Austausch-Korrelations-Wechselwirkung auftritt. Man kann dieses Problem mittels des Dichtefunktionaltheorems lösen, wofür es zwei Ansätze(LDA(lokale Dichtenäherung) und GGA(Gradientennäherung). Beides sind Nährungsverfahren und die Genauigkeit dieser hängt vom konkret betrachteten System ab. Auf Grund der begrenzten Rechenkapazität der Computer ist man nicht in der Lage eine adäquatere Lösung als eines dieser Nährungsverfahren für dieses physikalische Problem, wobei beide Verfahren mit Parameter behaften sind, welche noch für qualitativ brauchbare Ergebnisse optimiert werden müssen.

Spannungs-Dehnungs-Kurven von Aluminium

Vorbereitung

Es soll das Elastizitätsmodul von einem Aluminiumstabe experimentell und über eine Computersimulation bestimmt werden. Die Ergebnisse werden dann mit dem Literaturwert verglichen.

Ein Aluminiumstab wird in einer Zugprüfmaschine (Baujahr 1962) mit konstanter Geschwindigkeit gedehnt. Die Kraft wird mit einem Linux Rechner mit einer Messkarte plus Voltmeter gemessen und als Funktion der Zeit aufgezeichnet.

Die Verzerrung der Kristalle vom Aluminiumstab bewirkt eine Energieänderung. Diese kann mit einer Computersimulation vorausberechnet werden. Damit können die elastischen Konstanten bestimmt werden.

Durchführung

Zuerst heizten wir die Elektronenröhre des Verstärkers auf und machten uns während dieser Zeit mit dem Computerprogramm und den Geräten vertraut. In der Zwischenzeit maßen wir den Durchmesser unseres Probedrahtes und machte eine statistische Auswertung dieser Messreihe. Als dann der Verstärker völlig funktionsfähig war, kalibrierten wir die Apparatur. Hierzu stellten wir zu aller erst sicher, dass die Spannung des Signals bei unbelasteten Lastrahmen bei 0V war. Diesen Wert fixierten wir dann. Anschließend hängten wir eine Masse von 2kg an den Lastrahmen und kalibrierten nun die Ausgangsspannung des Verstärkers auf 40mV, sodass das Computerprogramm das Messsinganal auf die richtigen Einheiten normiert erhält. Dieser Wert wurde dann auch fixiert. Im nächsten Schritt spannten wir den Aludraht locker in den oberen Rahmen ein und bewegten die Lasthammer mit dem Motor dann langsam auf den Draht zu. Als der Abstand dann etwas größer war als die Länge der Messinglehren benützten wir dann noch das Handrad für die Feineinstellung. Danach spannten wir den Draht fest ein und entfernten die Messinglehren, mit welche wir die Länge des Drahtes auf 10cm festlegten. Nun wurde Computer und der Messrahmen startklar für das Experiment gemacht. Das Aufzeichnungsprogramm im Computer wurde gestartet und der Motor des Lastrahmens begann damit langsam das Drahtstück zu dehnen. Als sich dann das Drahtstück(laut Graph am Computerbildschirm) bei Verformung nicht mehr elastisch, sondern schon plastisch verhalten begann, kehrten wir so nach einer knappen Minute die Richtung um und ließen den Draht in seine Ausgangslänge zurückkehren. Als diese dann wieder erreicht war begannen wir erneut den Draht zu dehnen. Als er sich dann wieder länger plastisch verformte begannen wir die Dehnungsgeschwindigkeit zu erhöhen, bis es dann schließlich abriß.

Messwerte

Durchmesser des Aludrahtes

	d [mm]	
Messung 1		1,96
Messung 2		1,96
Messung 3		1,97
Messung 4		1,97
Messung 5		1,97
Mittelwert		1,966
Standardabweichung	0,005477226	
Gerätegenauigkeit		0,01

Die bearbeiteten Graphen der Messung mit der Zugprüfmaschine sind in der Beilage zum Protokoll zu finden.

Auswertung

Querschnittsfläche
e
3,035686424 mm ²
3,03569E-06 m ²

lineare Rezessionsgleichung
$y = -1,0576 \cdot 10^9 + 7,4114 \cdot 10^{10} x$
Elastizitätsmodul: 74 GPa

Druck auf Draht bei 1N	329414,7881 Pa
------------------------	-----------------------

Motorgeschwindigkeit	0,5 mm/min
	0,0005 m/min
	8,33333E-06 m/s

Länge von Draht	10 cm
	0,1 m

relative Längenänderung	8,33333E-05
-------------------------	--------------------

Position der wichtigen Punkte im Diagramm

	rel. Längenänderung	Spannung [Pa]
Elastizitätsgrenze	0,00441786	$3,84991 \cdot 10^7$
rückextrapolierte Streckgrenze	0,00467381	$4,43452 \cdot 10^7$
0,05% Streckgrenze	0,00514405	$4,51956 \cdot 10^7$
0,2% Streckgrenze	0,00678095	$4,79592 \cdot 10^7$

(siehe Beilagen)

Ab-initio Berechnung der elastischen Konstanten von Aluminium (Computersimulation)

Physikalische Grundlagen

Grundlagen der Quantenmechanik, Schrödinger Gleichung
Und zwei Näherungsverfahren für das Vielteilchenproblem:
- Local Density Approximation (LDA)
- Generalized Gradient Approximation (GGA)
ausgeführt von einem Computerprogramm (Abinit)

Elastizitätskonstanten:

$$\frac{\Delta E}{V_0} = 1/2 \sum_{i,j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j$$

Zenerkonstante:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$$

Schubmodul:

$$G = C_{44}$$

Elastizitäts-Modul:

$$E = 2C_{44} \left(1 + \frac{C_{12}}{2(C_{44} + C_{12})} \right)$$

Verwendete Geräte:

Computer (LINUX)

Durchführung

Für die erste Simulation öffneten wir die Eingabe-Datei alu1.in und veränderten den Wert für die Gitterkonstante in 0,01 Intervallen von 3,9 auf 4,05 Å. Nach jeder Änderung riefen wir das Programm auf und lasen den Wert für die Grundzustandsenergie aus. Danach wurden die Messwerte mit Hilfe des Computerprogramms Origin analysiert.

Für die zweite Simulation, welche einen genaueren Wert für die Gitterkonstante liefern sollt, überprüften wir die Einstellung in der Datei alu2.in und riefen dann das Programm damit auf. Der berechnete Wert wurde dann aus der Ausgabedatei ausgelesen und notiert.

Die dritte Simulation begann mit der Edition der Eingabedatei alu3.in. Wir setzten die Matrizen auf die vorgegeben Werten und ließen jeweils danach das Programm laufen und lasen den Energiewert aus. Auf Grund eines kleinen Missverständnisses aus der Angabe machten wir ein klein wenig Extraarbeit und berechneten auch die Werte für Streckungen von $\varepsilon = 0,02$ bis $0,04$.

Messwerte(aus Simulation)

Alu1-Simulation

Gitterkonstante [Å]	Grundzustandsenergie [eV]
3,9	-5,70976502099449*10 ¹
3,91	-5,71011892916596*10 ¹
3,92	-5,71035697269830*10 ¹
3,93	-5,71060002325128*10 ¹
3,94	-5,71072889735183*10 ¹
3,95	-5,71088391578735*10 ¹
3,96	-5,71094145037861*10 ¹
3,97	-5,71096901304801*10 ¹
3,98	-5,71093196560772*10 ¹
3,99	-5,71084820019553*10 ¹
4	-5,71075902536315*10 ¹
4,01	-5,71059890360915*10 ¹
4,02	-5,71038773920334*10 ¹
4,03	-5,71017723358900*10 ¹
4,04	-5,70991756031886*10 ¹
4,05	-5,70958416703516*10 ¹

Alu2-Simulation

Gitterkonstante: 4,05090972611 Å

Alu3-Simulation

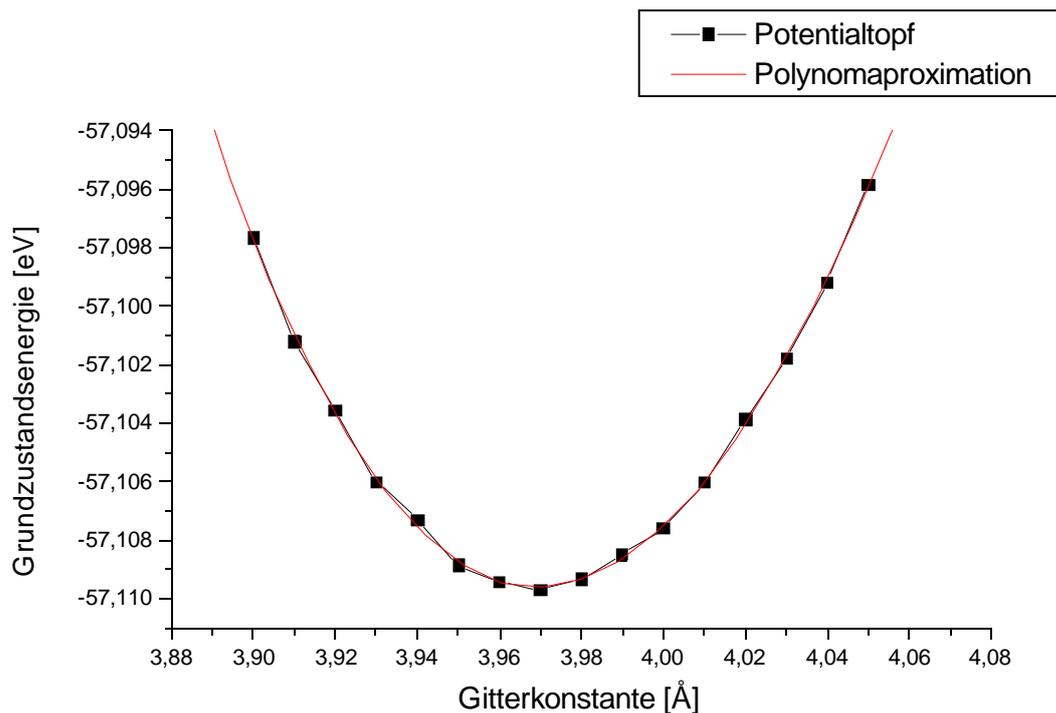
	e	Energie [eV]	Energie [J]	(E _{verzerrt} - E _{unverzerrt}) [J]	DE/V [J/m ³]	C [Pa]	
Unverzerrt	0	-225,760020906427	-2,3072674137*10 ⁻¹⁷	-	-	-	
Verzerrung 1	0,01	-225,757746983720	-2,3072441742*10 ⁻¹⁷	2,3239490065*10 ⁻²²	3495980	69919593484	C11
Verzerrung 1	0,02	-225,751121267629	-2,3071764594*10 ⁻¹⁷	9,0954308516*10 ⁻²²	13682504	68412519585	C11
Verzerrung 1	0,03	-225,741196037276	-2,3070750235*10 ⁻¹⁷	1,9239016272*10 ⁻²¹	28941775	64315056111	C11
Verzerrung 1	0,04	-225,727449572489	-2,3069345346*10 ⁻¹⁷	3,3287903285*10 ⁻²¹	50075898	62594872430	C11
Verzerrung 1	-0,0						
Verzerrung 1	1	-225,758130722475	-2,3072480960*10 ⁻¹⁷	1,9317679989*10 ⁻²²	2906011	58120222436	C11
Verzerrung 2	0,01	-225,759049794734	-2,3072574889*10 ⁻¹⁷	9,9247615025*10 ⁻²³	1493009	9953392375	C'
Verzerrung 3	0,01	-225,757279508957	-2,3072393966*10 ⁻¹⁷	2,8017082144*10 ⁻²²	4214686	21073429199	C44

Auswertung

Die Werte auf der Alu1-Simulation wurden zuerst einmal in einem Diagramm Gitterkonstante gegen Grundzustandsenergie aufgetragen. Anschließend wurde mit Hilfe des Computers die Kurve mittels eines Polynoms 3ten Grades approximiert. Dieser weitere Graph wurde auch ins Diagramm eingetragen. Doch viel interessanter war die konkrete Gestalt der Näherungsfunktion, welche uns aber auch das Programm anzeigte. Sie lautete

$$y = 130,40794 - 132,6460 \cdot x + 31,17575 \cdot x^2 - 2,42033 \cdot x^3$$

Durch Differentiation, anschließend gleich Null setzen und lösen mittels der Lösungsformel für quadratische Gleichungen erhielten wir zwei Extremwerte für die Funktion. Nur einer davon lag im von uns untersuchten Intervall und war wie schon aus dem Graphen ersichtlich ein Minimum, sodass wir uns eine zusätzliche mathematische Überprüfung dieses Faktums sparen konnten. Dieses Minimum lag bei **3,8809 Å** (Nebenbemerkung: die zweite Lösung lag bei 4,706 Å).



Die Auswertung für die Alu2-Simulation bestand lediglich darin, den gesuchten Wert in der Ausgabe-Datei zu finden und richtig abzuschreiben. Danach mussten wir schon vorbereitend für die Alu3-Simulation den Wert von Angstrom in Meter umrechnen und zur Dritten nehmen um das Volumen einer Einheitszelle so zu berechnen. Dies ergab einen Wert von $6,6475 \cdot 10^{29} \text{ m}^3$.

Aus den Daten der Alu3-Simulation wurde zuerst einmal nach der Umrechnung ins SI-System aus die Energiedifferenz zwischen den unverzerrten und den um 1% gestreckten Zustand berechnet werden. Dieser Wert wurde in die Formel

$$C_{11} = 2 \cdot \Delta E / V_0 \cdot \epsilon^{-2}$$

eingesetzt und man erhielt ein C_{11} von $69,92 \text{ GPa}$. Bei der Stauchung um 1% ergab die Rechnung ein Wert von $58,12 \text{ GPa}$. Durch eine anders gerichtete Verzerrung erhielten wir weitere Energiewerte. Von denen wurde wieder die Differenz zur Energie des unverzerrten Zustands ermittelt und dann durch einsetzen in folgende Formeln ein C_{12} und ein C_{44} berechnet. Für das C_{11} in der kommenden Formel haben wir den Wert der Streckung verwendet.

$$C' = 2/3 \cdot \Delta E / V_0 \cdot \epsilon^{-2}$$

$$C_{12} = C_{11} - 2 \cdot C'$$

$$C_{44} = \Delta E / V_0 / (\epsilon^2 \cdot 2)$$

Durch Einsetzen ergaben sich dann folgende Werte für $C_{12} = 50,01 \text{ GPa}$ und $C_{44} = 21,07 \text{ GPa}$. Durch weiters einsetzen dieser Werte in die Formel für den Anisotropiefaktor A und das Elastizitätsmodell (Nährungsformel für $A \sim 1$):

$$A = 2 * C_{44} / (C_{11} - C_{12})$$

$$E = 2 * C_{44} * (1 + (C_{12} / (2 * (C_{44} + C_{12}))))$$

erhält man ein A von $2,12$ und schlussendlich ein Elastizitätsmodul von $56,97 \text{ GPa}$.

Interpretation

Beim Auftragen der Gitterkonstante gegen die Grundzustandsenergie aus den Werten der Alu1-Simulation war sehr schön der Potentialtopf zu erkennen. Man sah auch sofort, dass es sich beim der Extremstelle, des Approximationspolynoms, welches den Graphen in betrachteten Bereich sehr gut näherte, um ein Minimum der Energie, also eine stabile Lage, handelt. Jedoch weicht der daraus berechnete Wert für die Gitterkonstante von $3,8809 \text{ \AA}$ leider vom Literaturwert, welcher bei $4,05 \text{ \AA}$ liegt, um $4,18\%$ ab. Auch wenn dieser Wert schon in der richtigen Größenordnung liegt, zeigt sich, dass LDA-Methode (wurde bei Simulation Alu1 verwendet) bei Aluminium ungenauer ist, als die GGA-Methode, welche in der Alu2- und später auch in der Alu3-Simulation verwendet wurde. Denn der Wert für die Gitterkonstante, welchen wir aus der Alu2-Simulation erhielten trifft mit $4,0509 \text{ \AA}$ schon fast genau den Literaturwert. Daraus ergibt sich, dass für die Simulation der elastischen Eigenschaften von Aluminium die GGA-Methode eindeutig der LDA-Methode vorzuziehen ist. Der aus der Alu3-Simulation sich ergebende Anisotropiefaktor von gut 2, zeigt, dass Aluminium zwar in erster Näherung noch ein halbwegs isotropes Material ist, doch wie man dann am errechneten Elastizitätsmodul von $56,97 \text{ GPa}$ sieht, weicht dieser Wert schon um $18,6\%$ vom Literaturwert von 70 GPa ab. Der C_{11} -Wert welcher einer geraden Spannung entsprechen würde, trifft dafür den Literaturwert mit $69,92 \text{ GPa}$ fast genau. Wie es in den Messwerten auch schon auffällt zeigt sich eine gewisse Anisotropie des Aluminiums schon bei der Stauchung, da dieser Wert definitiv von Dehnungswert abweicht. Dies kann daran liegen, dass eine Verzerrung von 1% schon relativ groß ist und daher die Wert bereits abzuweichen beginnen. Aus unseren überflüssigen Messung zeigt sich nämlich, dass die Elastizität bei weiterer Streckung abzunehmen beginnt, was mit dem zu kleine Wert für das Elastizitätsmodul übereinstimmen würden, wenn man annimmt, dass 1% bereits eine recht große Verzerrung ist. Vielleicht wären weitere Simulation mit Verzerrungen kleiner als 1% vernünftig gewesen und würden genauere Werte und eine sicherlich auch eine kleinere Anisotropie liefern.