

Simulation der Anodischen Auflösung von Silizium

Advanced

Schickt man elektrischen Strom durch ein Stück **Si** im Kontakt mit einem geeigneten Elektrolyten, wird es sich oft nicht nur einfach auflösen, sondern zahlreiche, teilweise extrem seltsame Phänomene zeigen, die Gegenstand der laufenden Forschung sind.

Ein [weiteres Beispiel](#) zu dieser allgemeinen Thematik "Halbleiter - Elektrolyt Kontakt" findet sich im Link, und eine kurze Gesamtschau in einem [populärwissenschaftlichen Artikel](#).

Hier betrachten wir die unter bestimmte Umständen beobachteten **Stromoszillationen**. Sie treten auf, obwohl extern eine konstante Spannung anliegt.

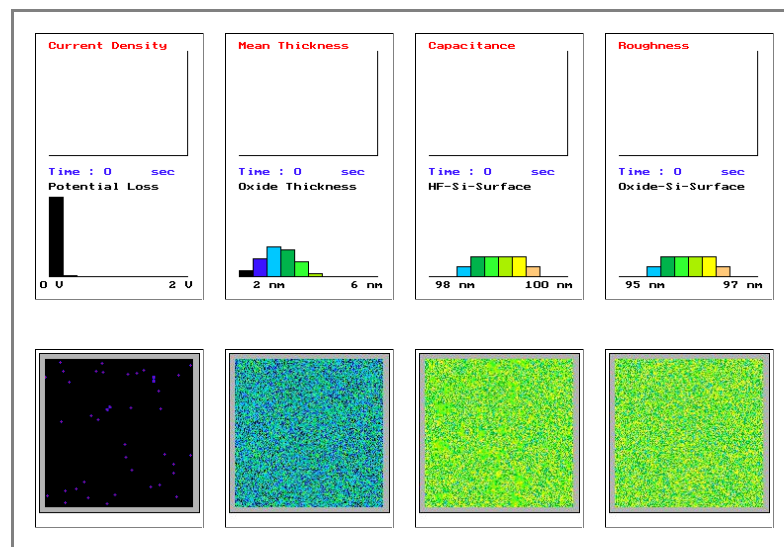
Dieser Effekt, obwohl altbekannt, wurde lange Zeit nicht verstanden; erst vor einigen Jahren gelang es am Lehrstuhl, das Rätsel zu lösen.

Instrumentell ist ein von J. Carstensen geschriebenes "Monte Carlo" Simulationsprogramm, das die Verhältnisse an der Grenzfläche **Si** - Elektrolyt im nahezu atomaren Maßstab nachvollzieht.

Es zeigt sich, und das kann in den Animationen unten gesehen werden, daß der Strom in sehr kleinen ($\approx \text{nm}$) Bereichen zwar leicht an- und ausgehen kann, daß das Geheimnis der extern beobachteten Oszillationen aber darin liegt, wie sich die vielen kleinen Lokaloszillatoren untereinander synchronisieren.

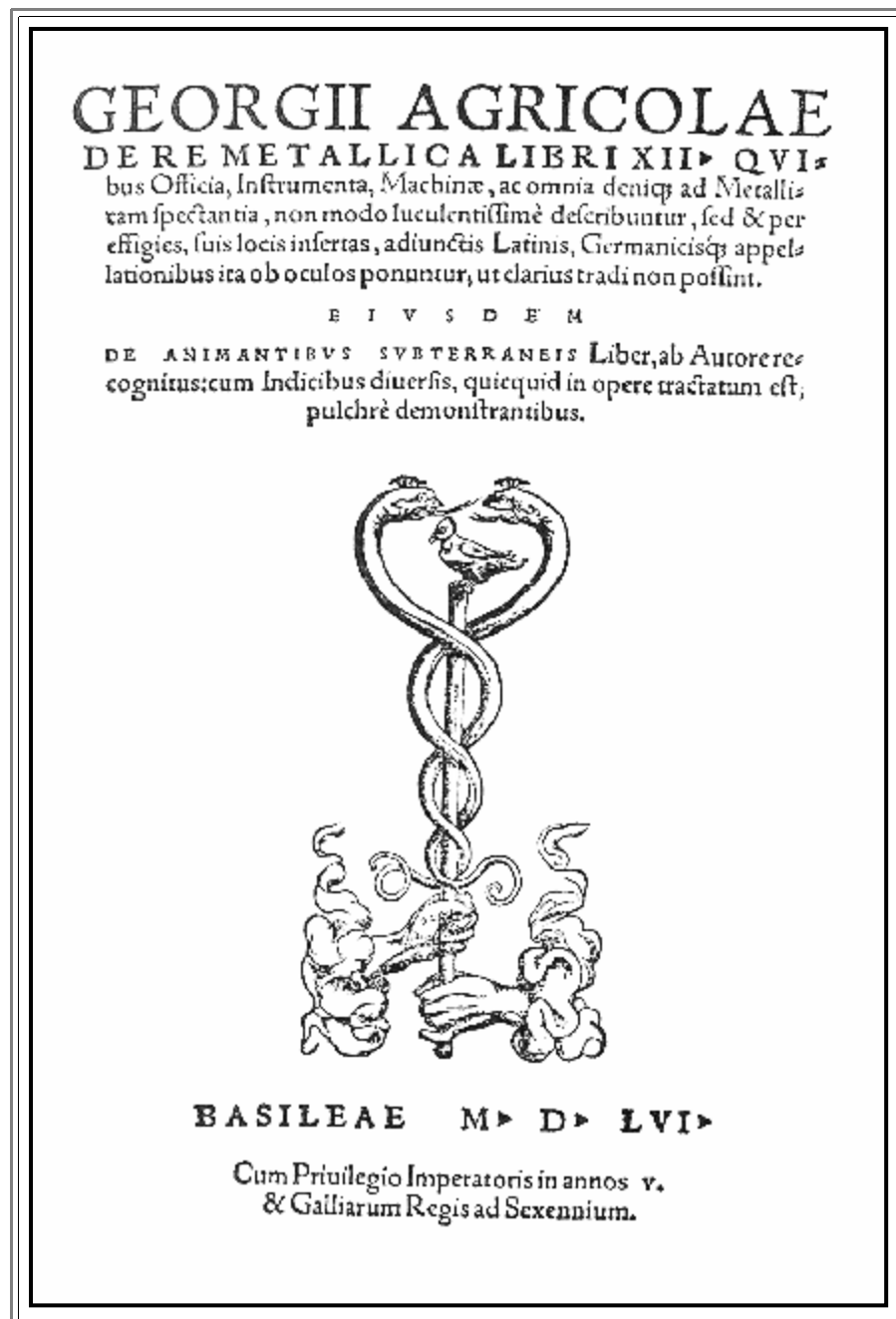
Die Simulationen zeigen:

- Die extern gemessene **Stromdichte** ("current density"). Sie oszilliert genauso wie man das auch im Experiment findet.
- Die **mittlere Dicke** des laufend gebildeten (und wieder aufgelösten) Oxids ("mean thickness").
- Die **Kapazität** des Kondensators **Si** - Oxid - Elektrolyt ("Capacitance")- eine meßbare und gemessenen Größe
- Die Rauheit der Grenzfläche; ebenfalls ein (gemessener) Schlüsselparameter. Hier sieht man vor allem den "Perkolationsübergang", der zu einer Synchronisation der einzelnen "Pixel"oszillatoren führt: Die Rauigkeit wird plötzlich klein.



De Re Metallica

Hier ist das Titelblatt zu "De Re Metallica" von Agricola:



Historisch gesehen, eines der wichtigeren Bücher. In der "Zeit" vom 18.3. 1994 wurde Agricola zu seinem 500. Geburtstag eine ganze Seite gewidmet:



Der Mann, der aufschrieb, wie das Silber aus dem Berg kommt

Von Gero von Randow

Sachsen feiert. Und mit ihm die gelehrte Welt: nämlich den 500. Geburtstag des enzyklopädischen Humanisten Georgius Agricola. Der Sachse begründete die erste Technikwissenschaft, die Montanwissenschaft, und außerdem die Mineralogie. Er verfasste neben vielen Werken eines, das noch heute zu den schönsten Technikbüchern der Welt zählt: *De re metallica*, das überbordende Kompendium des Bergbaus und der Hüttenkunde.

Jubiläum ist der 24. März. Im Jahre 1494 wurde in Glauchau bei Zwickau ein Georg Pauer (also Bauer) geboren. 21 Jahre später war aus dem Handwerkssohn der Leipziger *Baccalaureus* „Georgius Agricola aus Glauchensis“ geworden. Die Latinisierung des Namens lag im Trend; aus dem Zeitgenossen Kopernikus wurde, beispielsweise, Copernicus. Man war humanistisch. Von beschabbarthen Wittenberg diffundierte die Reformation herüber; dort lehrte Martin Luther seit 1510 Theologie.

Als 24-Jähriger wurde Agricola Rektor der griechischen Schule in Zwickau. In der Stadt ging es hoch her, für oder wider die Reformation, pro und contra Franziskaner. Der Graecist ergriff Partei, klärte gegen den Abfallhandel, und in seiner Schule wollte er nicht nur Kirchenteller einstudieren, sondern auch Ackerbau, Weberei, Bau- und Maßwesen lehren. 1520 tauchte sogar Thomas Müntzer in Zwickau auf und wurde Tre-

Am 24. März 1494 wurde in Glauchau bei Zwickau Georgius Agricola geboren. Er begründete die erste Technikwissenschaft und stritt sich mit seinen Zeitgenossen heftig über Ökologie und Ökonomie

lica, bietet noch immer unerschöpfliches Lesevergnügen. Das quält über von Beschreibungen der Erze und Gesteine, Verfahren und Berufe, ist ein kaleidoskopisches Rezeptbuch und gibt gerade wegen seiner Fülle und Diversität eine Anschauung vom Erfindungsgeist der frühen Montanwissen-

wesen sein. Heute haben wir Telefon und Kopierer und Fax und Fernsehen und Electronic Mail, aber diese Neugier? Für einen freien Geist gab es in der Frühen Renaissance überall Neuland und Abenteuer. In unserer Zeit hingegen gibt es auf fast jedem Wissensgebiet eine Expertenkultur, in die sich der Neuling erst einmal hineinfinden muß.

Wo kann, wo sollte, eine Grube eingerichtet werden? An der Standortanalytik, die in *De re metallica* begrifflich dargestellt ist, müßten Wirtschaftsgeographen ihre helle Freude haben. Geologische, landschaftliche, logistische, ökonomische, politische Faktoren sind zu bedenken. „In einer unter Tyrannenherrschaft stehenden Landschaft legt ein Bergmann keine Baue an“ (Beifall). Der aufregendste Band der *De re metallica* ist vielleicht der sechste, in dem Agricola Bergbaumaschinen präsentiert. Das große Problem war stets die Beseitigung des Grubenwassers, und zu jener Zeit hatten die Bergleute beachtliche Pumpen konstruiert, wahre Holzmonster manchmal. Den Unterschied zur Römerzeit machte die Energiequelle, nämlich die Wasserkraft. Agricola: „Überhaupt wird Wasser durch Wasser gehoben.“

„Wettermaschinen“ zum Entgassen und Belüften der Stollen wurden wiederum von Windrädern angetrieben. Die Windmühle mißfällt Agricola eher, „weil sie sich nicht dreht, falls kein Wind

Am Rande ist folgendes noch ganz interessant:

The mining engineer Herbert Hoover (1874 – 1964), together with his wife, translated in his spare time the famous book "De Re Metallica" by Agricola, from Latin to English. in 1912. In some footnotes he offered his thoughts on the history of iron, in particular that the iron age began much earlier than is usually assumed. The iron plate of Gizeh was interpreted as a clear hint that very early Egyptians could produce iron. And yes, H. Hoover was also the 31st *President of the United States* from 1929 to 1933. Those were the good old times when American Presidents could not just read and write but even understood foreign languages. In 2019 things have changed.

Silikone und Materialwissenschaft

Silikone sind nützlich für viele Produkte, nicht nur für besonders hervorragende Anwendungen bei Damen. Die Risiken bei ungeeigneter Materialauswahl für Hersteller und Verbraucher sind im unten wiedergegebenen Artikel ebenfalls deutlich dargestellt.

Advanced

Hersteller von Silikon-Implantaten bieten Entschädigung an

3,7 Mrd. für falsche Busen



Birmingham (afp/KN) Die drei wichtigsten US-Hersteller von Brust-Implantaten aus Silikon haben sich nach eigenen Angaben verpflichtet, insgesamt 3,7 Milliarden Dollar (knapp 6,5 Milliarden Mark) für Entschädigungszahlungen bereitzustellen. Die Patientinnen fordern Wiedergutmachung, weil unter anderem die Implantate gerissen waren. Die Zahl der US-Bürgerinnen, die sich solche Silikon-Produkte einpflanzen ließen, liegt bei mehr als einer Million.

Der wichtigste Hersteller, Dow Corning, erklärte sich nach diesen Angaben zur Zahlung von zwei Milliarden Dollar bereit. Bristol-Myers Squibb sagte 1,15 Milliarden Dollar zu und Baxter Healthcare weitere 556 Millionen. Diese Summen sollen einem Sonderfonds zur Verfügung gestellt werden, der während einer Laufzeit von 30 Jahren alle Entschädigungszahlungen begleichen soll, die den betroffenen Frauen von der Justiz zugesprochen werden.

Die Silikon-Implantate sind in den USA bereits seit Januar 1992 nur noch bei medizinischer Indikation zulässig, nachdem Hunderttausende Frauen Klagen eingereicht hatten. Das Bundesgesundheitsamt in den USA hat sogar ein völliges Verbot von Silikon-Implantaten in Erwägung gezogen. Das Amt hatte begründet, daß sich die Implantat-Hersteller die Unbedenklichkeit der Einlagen über einen längeren Zeitraum nicht ausreichend nachgewiesen hätten. Sollten die Silikon-Einlagen verboten werden, müßten Millionen Frauen, unter ihnen die Schauspielerin Brigitte Nielsen, um ihren formmachten Busen fürchten, da die künstliche Oberfläche alle paar Jahre erneuert werden muß. Bei einem Verbot stellt sich die Frage: Wo hin?

AUCH IN RIO hat der Karneval seine Reize. Pure Lebensfreude strahlt durchs Samba-Drome der Stadt an der Copacabana tänzle. Während man sich in Brasilien zur Karnevalzeit – wie man sieht – in beneidenswert leichter Kostümierung auf die Straße trauen kann, müssen sich die Jacken herzlos bei zwar strahlendem Sonnenschein über erheblichen Minusgraden warm anziehen. Viele von ihnen versuchen offenbar, sich von innen her zu wärmen. Auf den Polizeiwachen in Nordriem-Westfalen stapeln sich die Führerscheine alkoholisierten Autofahrer. Bei Verkehrskontrollen von

Weiertastracht bis einschließlich Rosenmontag mußten nach Angaben des Düsseldorfer Innenministeriums 929 angehaltene Verkehrsteilnehmer ihre Fahrerlaubnis abgeben – fast genauso viele wie im vergangenen Jahr, als über Karneval 932 Fahrer mit Promille am Steuer erwischt wurden. Allerdings wurden deutlich mehr Autos kontrolliert als im Vorjahr: Während 1993 noch knapp 123.000 Fahrzeuge an den Straßenrand geworfen wurden, waren es diesmal 143.959. Über 27.500 Fahrer mußten ins Räderchen steigen, ein Fünftel mehr als im Vorjahr. Zugleich sank jedoch die Zahl der Verkehrsunfälle deutlich von 812 im vergangenen Jahr auf 510.

For:ap

Mit freundlicher Genehmigung der Kieler Nachrichten

Das Bild der Kieler Nachrichten (1997) zeigt die Bedeutung der Silikone nur unvollkommen. Bessere Darstellungen findet man im Internet; sowohl zur (wahren oder angeblichen) Gesundheitsschädigung durch Implantate, als auch zu besonders herausragenden Exemplaren.

Silikone und (fröhliche) Materialwissenschaft

■ Silikone können - selbst versteckt - sehr ansehnlich sein; vom Silizium läßt sich das nicht behaupten. Das unten aus Copyright Gründen nicht mehr gezeigte Bild findet man - neben vielen anderen - im Internet, wenn man den Suchbegriff "Silicones+ breasts" eingibt. Das zweite ((nicht mehr gezeigte) Bild findet sich dann fast von selbst.

- In den Lippen findet sich übrigens ein zweites Material (**Collagen**), das aber im Gegensatz zum Silikon, regelmäßig erneuert werden muß.

Hier war mal ein Bild von **Pamela Anderson**

Hier war mal ein Bild von **Dolly Parton**

Advanced

Materialermüdung in der Zeitung

Advanced

Nachfolgend eine kleine Sammlung von Zeitungsartikeln, in denen ein Material **müde** wurde (auch Rißbildung fällt darunter, selbst wenn das Schlagwort "Materialermüdung" in dem Artikel nicht fällt):

Bolzen-Riß verursachte Absturz

Untersuchung der Amsterdamer Flugzeugkatastrophe beendet

Den Haag (dpa) – In den letzten Minuten vor der Flugzeugkatastrophe von Amsterdam am 4. Oktober 1992 haben auch der Tower des Flughafens Schiphol und die Besatzung der Unglücksmaschine Fehler gemacht. Die Piloten gaben zu wenige Informationen weiter, der Fluglotse drückte sich mißverständlich aus. Das geht aus dem Abschlußbericht über die Unglücksursache hervor, den eine unabhängige Expertenkommission in Den Haag jetzt der niederländischen Verkehrsministerin Hanja Maij-Weggen übergeben hat.

Bei dem Unglück war eine Frachtmaschine der israelischen Luftfahrtgesellschaft El Al vom Typ *Boeing 747* auf einen Wohnblock gestürzt. Drei Besatzungsmitglieder, eine Passagierin und mindestens 43 Bewohner des Hauses kamen ums Leben. Wie schon in einem Mitte Oktober 1993 präsentierten Zwischenbericht machten die Fachleute jedoch vor allem den amerikanischen Flugzeug-Hersteller *Boeing* für die Katastrophe verantwortlich.

Dem Expertenbericht zufolge brach kurz nach dem Aufstieg der Unglücks-

maschine vom Flughafen Schiphol einer der Befestigungsbolzen des inneren Triebwerks unter dem rechten Flügel wegen **Materialermüdung** ab. Das äußere Triebwerk wurde dabei mitgerissen, wodurch ein solches Ungleichgewicht entstand, daß die Maschine kaum noch zu steuern war und abstürzte.

Wie von den Experten gefordert, hat *Boeing* inzwischen mit der Erneuerung der Triebwerkbefestigungen bei sämtlichen Maschinen vom Typ 747 begonnen. Die Kommission empfiehlt in ihrem Bericht aber auch, Piloten künftig besser auf eine Situation vorzubereiten, in der mehrere Triebwerke ausgefallen sind und die Maschine nur noch sehr schwer zu steuern ist. Auch die Ausbildung der Fluglotsen sollte nach Ansicht der Experten verbessert werden. „In Notsituationen muß nicht nur an die Sicherheit des Flugzeugs und der Passagiere, sondern auch an die von Dritten gedacht werden, besonders über bewohnten Gebieten“, heißt es in dem Bericht. Nach dem Verlust der beiden Triebwerke war die israelische Maschine in einem Bogen quer über Amsterdam geflogen.

BAYERN

Seite 47–48

Materialermüdung schuld an Chaos auf Bahnhöfen

ICE Walter Gropius riß zwischen München und Augsburg Oberleitung ab. Entnervte Pendler stürmten Ersatzbusse.

67 neue Risse im Kernkraftwerk Krümmel

Kiel (Ino) Im Kernkraftwerk Krümmel bei Geesthacht sind neue Risse entdeckt worden. In den eisenhaltigen (ferritischen) Rohrleitungen des mit schwach radioaktivem Wasser durchfluteten Speisewassersystems habe man 67 betriebsbedingte Risse geringer Größe und Tiefe entdeckt, bestätigte gestern ein Sprecher Energieministeriums in Kiel.

Die Fehler, die auf Dehnungskorrosion zurückzuführen seien, sollen durch Ausbesserungsarbeiten behoben werden.

In dem seit August 1993 abgeschalteten Atommeiler waren bereits im vergangenen September bei einem Sonderprüfprogramm im Rahmen des Brennelemente-Wechsels drei Risse an Schweißnähten im Austenit-Stahl entdeckt worden.

Aufgetreten waren sie im

Bereich eines Kernflutstutzens des Reaktordruckbehälters sowie im Bereich des Reaktorwasserreinigungssystems. Nach Auftauchen eines Lecks im Speisewassersystem war die Prüfung auf 876 Nächte im ferritischen System angeordnet worden.

Abgeschaltet ist wegen zahlreicher Risse auch das ebenso für Hamburgs Stromversorgung wichtige KKW Brunsbüttel, das im Sommer 1992 vom Netz ging. Ein Anfahren beider Reaktoren ist nach Angaben des Ministeriums noch nicht absehbar. Gutachten würden ausgewertet und Reparaturanträge des Betreibers, der Hamburgischen Electricitäts-Werke (HEW), bearbeitet.

Für heute Mittwoch haben Kernkraftwerks-Mitarbeiter eine Demonstration mit 1500 Menschen vor dem Kieler Rathaus und dem Landtagsgebäude angemeldet.

„Materialermüdung“ bei Brückeneinsturz

Granada – Der Einsturz einer Autobahnbrücke in Südspanien, bei dem vorgestern sechs Arbeiter gestorben waren, geht möglicherweise auf Materialermüdung zurück. In der Region Granada war ein 60 Meter langes Teilstück einer – in Bau befindlichen – Talbrücke eingeknickt. dpa

KN; Nov. 2005

Verschleiß bei Fahrradfelgen

Advanced

Trivial, aber möglicherweise tödlich: Fahrradfelgen verschleissen - wie so vieles andere. Siehe dazu unten das Zitat aus einem Artikel der "Fahrradwelt".

- Felgenbremsen müssen nun mal an der Felge reiben; Verschleiss ist die unabwendbare Folge.
- Falls die Wandstärke der Felge irgendwo eine kritische Dicke unterschreitet, wird sie schlicht "platzen". Die Folgen beim Fahren sind eher unangenehm.
- Aber von was hängt es ab, wie schnell die Felge verschleisst? Was kann man dagegen tun? Wie optimiert man die Forderungen nach hoher Verschleissfestigkeit, hohe Festigkeit des Rads, gute Bremswirkung, kleines Gewicht und selbstverständlich kleine Kosten?
- Durch Optimieren der Materialien!



Mehr zum Verschleiß in [Kapitel 10](#)

Felgenverschleiß durch Bremsabrieb:

Forderung nach Sicherheitsfelgen !

Die Situation schien klar – bremsverschleißbedingte Brüche von Alufelgen hatten in den vergangenen Jahren allenthalben hitzige Diskussionen verursacht. Geschädigte stellten Schadensersatz- und Schmerzensgeldforderungen. Es war deshalb geplant, in der im vergangenen Herbst neu erschienenen DIN 79100-2 diesem Sicherheitsrisiko für Endverbraucher Rechnung zu tragen und entsprechende Vorgaben zu machen. Bedauerlicherweise konnte man sich nicht mehr rechtzeitig auf eine geeignete Vorgehensweise verständigen – dies soll erst jetzt im Nachhinein und ohne Hektik erfolgen.

Inzwischen scheint es um den Schutz vor bremsverschleißbedingten Felgenbrüchen etwas stiller geworden zu sein.

Grund genug für uns, dieses Thema wieder aufzugreifen und die aus unserer Sicht aktuelle Situation zu beleuchten.

- Wir fragten uns, haben Industrie und Handel den Endverbraucherschutz aus ihren Augen verloren?
- Was geschieht mit der zurückgestellten Normvorgabe für eine Sicherheitsfelge, welche Schutz vor unerwarteten Felgenbrüchen bieten können soll?
- Was sagen Endverbraucher zu diesem für sie doch so wichtigen Thema?

Wir hatten Gelegenheit, anlässlich verschiedener Veranstaltungen Meinungen sowohl von Experten wie auch von möglichen Betroffenen einzuholen. Diese Meinungen lassen sich in etwa wie folgt zusammenfassen:

Während die einen Endverbraucher ihrer Verwunderung Ausdruck gaben, dass die praktische Umsetzung dieser Sicherheitsmaßnahme eine solch lange Zeit in Anspruch nimmt, sind andere überrascht, daß es ein solches Problem überhaupt gibt (sie meinten, daß dies doch gar nicht sein dürfte).

Händler verhalten sich zum großen Teil passiv und warten auf die Reaktion der Hersteller.

Und was tun Letztere?

Nun – wie wir auf der letztjährigen IFMA in Köln sehen konnten, gibt es trotz Uneinigkeiten bezüglich der normgerechten Umsetzung bereits einige hoffnungsvolle Ansätze einzelner Felgenhersteller.

..... *Ende Zitat*

Allgemeine Bücher zur Materialwissenschaft

Advanced

■ Hier zunächst einige Titel mit erzählendem und/oder historischem Charakter

- **Queisser.**
Kristalline Krisen
(zwischenzeitlich wohl vergriffen)
- **Sass**, Stephen L.
The Substance of Civilization.
Arcade Publishing 1998
- **Amato**, Ivan
Stuff - the Materials the World is Made of.
Basic Books 1997
- **Hummel**, Rolf E.
"Understanding Material Science - History, Properties, Applications"
Springer Verlag, 1997
- **Kahn**
"The Coming of Materials Science
Pergamon 2001

■ Alle diese Bücher sind "erzählerisch" geschrieben, und teilweise spannend zu lesen. Im [Link](#) gibt es noch Zusatzinformationen

- Diese Bücher hat jede bessere Bibliothek, sonst bei mir nachfragen.

Materialwissenschaft als "Kunst"- Materialwissenschaft in der "Kunst"

Advanced

Der Mensch unterscheidet sich - unter anderem - vom Tier durch den Gebrauch von Werkzeugen, die er sich selbst hergestellt hat. Dabei kann man annehmen, daß lange bevor er Feuerstein bearbeitete, andere Materialien in Gebrauch waren, die sich aber nicht so gut erhalten haben, z.B. Holz, Knochen oder Fell. Wie auch immer, die Auswahl und Bearbeitung von natürlichen Materialien, um sie als Werkzeug für bestimmte Zwecke zu benutzen (auch Kleidung ist in diesem Sinn ein Werkzeug), markiert (vielleicht zusammen mit der Astronomie) den Beginn der Menschheit, der Zivilisation und der Wissenschaft: Es wurde **Wissen** geschaffen - durch Versuch und Irrtum - und an andere Menschen weitergegeben.

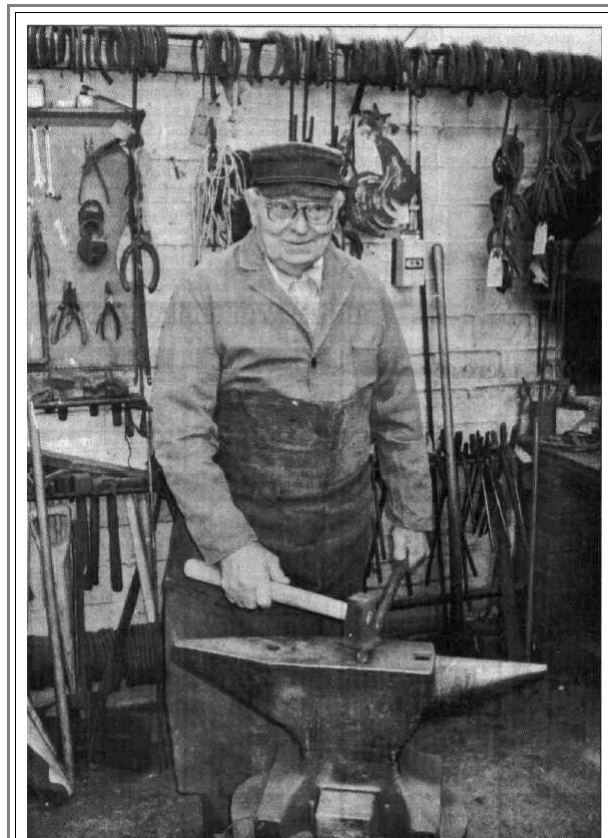
- Die Beherrschung des Steins - oder wie wir als Materialwissenschaftler sagen würden - der natürlichen Keramiken - war der Auftakt zu den ersten Hochkulturen. Die Pyramiden wurden fast ohne Metalle gebaut - nur Werkzeuge aus Stein und allenfalls Kupfer waren im Einsatz!
- Der Durchbruch kam mit den Metallen; nach Kupfer kam die Bronze, schließlich Eisen und **Stahl**. Die Römer wären ohne Metalle nicht denkbar; ob ihre Überlegenheit auch auf überlegener Technik beruhte, kann man sich getrost auch mal fragen.
- Bergleute und Schmiede hatten in allen Kulturen eine Sonderstellung - nicht unbedingt immer eine gehobene Stellung - aber doch den Hauch von etwas Besonderem, etwas **Geheimnisvollem**.
- Im **19.** und Anfang des **20.** Jahrhunderts hatte man die Beherrschung der Metalle soweit gelernt, daß man Schlachtschiffe, gigantische Brücken oder den Eiffelturm, aber auch komplizierte Taschenuhren oder feinste Nähnadeln bauen konnte. Aber **verstanden**, warum Metalle sich so verhalten wie sie es tun, und warum sie ihre Eigenschaften durch "Schmieden" stark ändern können, **verstanden** hatte man das alles nicht - es war nach wie vor eine "Kunst".

Das Bild unseres Schmieds stammt aus dem Jahr **1998** - der nette alte Herr war da noch aktiv. (Er sieht, am Rande bemerkt, dem Schmied, der gegenüber von meinem Elternhaus in den **50er** und **60er** Jahren auf seinem Amboß herumklopfte, verblüffend ähnlich). Auch mein Großvater, der auch Schmied war, hat nicht viel anders ausgesehen.

- Unser Schmied sieht nicht gerade so aus, wie man sich den jungen **Siegfried** am Amboß vorstellt, aber zumindest hat es in **Mimes** Schmiede (bei Wagner nachlesen), nicht viel anders ausgesehen als bei unserem Zeitgenossen.

Nach dem **2.** Weltkrieg sollte sich das alles ändern - ohne Weltkrieg wäre es wohl schon etwas früher passiert. Seit ca. **1930** wußte man nämlich, **was** im Inneren eines Metalls passiert wenn man darauf herumklopft, und **warum** sich die Eigenschaften dabei ändern.

- Nach einer Phase der **Analyse**, die das neue Wissen nutzte um nachträglich das Altbekannte zu verstehen und zu verbessern, sind wir jetzt zunehmend in einer Phase der **Synthese**, d.h. wir probieren nicht mehr alles mögliche aus um einen neuen metallischen Werkstoff zu finden, sondern wir überlegen uns, gewappnet mit dem Fundamentalwissen das wir jetzt haben, **vorher**, was wir zusammenlegieren um einen neuen Werkstoff mit bestimmten Eigenschaften zu bekommen.



- Aber nun zum **Siegfried**: Im **Wagnerschen "Ring des Nibelungen"**, wie auch in vielen anderen Großwerken der Literatur, hat ein Schwert (manchmal auch ein Ring) eine wichtige mystische Bedeutung.
- **Siegfrieds Schwert** - es hatte wie alle **berühmten Schwerter** einen Namen und hieß (bei Wagner) "**Notung**" - stammt vom Göttervater **Wotan** persönlich. Siegfrieds Vater **Sigmund** erwirbt es per "**Schwertprobe**" (rausziehen aus einer Esche; gelingt nur dem Auserwählten (erinnert uns das an was?)).
 - Leider wird Sigmund seines Besitzes nicht froh, denn Notung zerbricht im Kampf mit **Hunding** - aber nur weil Wotan dabei dem Hunding hilft.
 - Der Grund für den **Bruch** ist, daß der Götter-**CEO** Wotan von seiner Gemahlin **Fricka** (die sich ganz im Stil einer frühen **Frauenbeauftragten** aufführt - die entsprechende Passage ist dementsprechend zwar hochdramatisch aber seltsam öde), genötigt wird, Hunding siegen zu lassen um die "Ehre der Ehefrau und der Familie" zu schützen. Sigmund hatte es nämlich auf Hundings Weib (**Sieglinde**) abgesehen (die zufällig auch noch seine Schwester ist), was zwar im Sinne Wotans, aber nicht Frickas war.
- Merke: es brauchte einen Obergott, damit das Schwert bricht - so genau hatte man den **Bruch** damals noch nicht verstanden.
- Der junge Siegfried, der Sohn Siegmunds und Sieglindes (soviel Zeit war noch ("**Braut und Schwester bist du dem Bruder, so blühe nun, Wälsungenblut!**")), wächst bei dem zweideutigen Zwerg **Mime** auf, der zwar Tarnkappen und dergl. schmieden kann, aber die Stücke des Götterschwertes nicht zusammenbringt.
 - Das macht Siegfried dann persönlich - unter brausendem Gesang ("**Schmiede mein Hammer, mein Hammer schmiede**" oder "**Notung, Notung, neidliches Schwert**") und allerlei Herumgehüpf.
 - Das Schöne daran ist, daß wenn der Regisseur sich so halbwegs an Wagners Regieanweisungen hält, Siegfried wirklich **fast** alle wesentlichen Arbeitsabläufe des Schmiedens durchführt: **Abschrecken, Anlassen, Heiß- und Kaltverformung**.
 - Mit Notung bewaffnet macht er dann dem armen Drachen **Fafner** (der früher mal ein **Riese** war, dann aber zum Kapitalisten-Drachen mutierte ("**Ich lieg und besitz**") ohne besonderen Grund den Garaus. Obwohl vom Kämpfen und Singen etwas ermüdet, befördert er gleich drauf auch seinen Ziehvater Mime ins Jenseits - unter dem Vorwand eines schlecht gebrauten Tranks, sozusagen wg. Verletzung des Reinheitsgebots!
 - Er vollbringt noch die eine oder andere Heldentat, insbesondere erweckt er **Brünnhilde** (das Schärfste, was die nordische Antike damals zu bieten hatte) aus ihrem Dauerschlaf. Brünnhilde, eine Tochter Wotans (aber nicht Frickas!), wurde von Wotan seinerzeit in Tiefschlaf versetzt (ähnlich wie bei Dornröschens), weil sie entgegen seiner Weisung im Kampf Siegmund - Hunding dem Siegmund (ihrem Halbbruder) helfen wollte.
 - Daß Brünnhilde damit Siegfried sowohl Geliebte als auch Tante ist, überrascht bei der erblichen Vorbelastung niemand mehr.
- Mit Brünnhildes Hilfe überwindet Siegfried seine pubertären Phantasien - und wieder mal **blüht Wälsungenblut**.
- Notung, bis dahin sein Phallussymbol (Golf GTIs gab es noch nicht), braucht er jetzt nicht mehr, oder nur noch einmal, als er später nämlich Brünnhilde für König **Gunther** heimholt (er hatte sie zwischenzeitlich vergessen (angeblich unter dem Einfluß eines Zaubertranks) und stimmte ihrem Recycling zu). Denn damals war es üblich, daß der Held in solchen Fällen sein treues zweischneidiges Schwert im (gemeinsamen) Bett zwischen sich und der Dame ausstreckte (safer sex war noch nicht erfunden; und auch auf das **zwei**schneidig wurde Wert gelegt; manche Damen waren nämlich keine)).
 - Als ihn **Hagen** (der Sohn des **Alberichs**, eines Bruders Mimes, der seinerzeit ersatzweise den **Rheintöchtern** das **Rheingold** geklaut hat (eigentlich wollte er ihnen die Unschuld rauben) und damit das ganze Schlamassel startete) dann von hinten meuchelt (mit einem Speer), geht die Welt dann auch relativ zügig unter (Brünnhilde singt dazu); denn viele Optionen gibt es nicht mehr.
- Wir lernen daraus: Wenn man nichts genaues über die Bruchfestigkeit von geschmiedeten Stählen weiß, sollte man Vorsicht walten lassen; zumindest sich aber nicht mit Frauenbeauftragten anlegen. Denn eins führt zum andern; zum Schluß geht die Welt unter.
- Wir lernen weiterhin: Die Beherrschung der **Metallurgie** - symbolisiert durch den Besitz des magischen Schwerts **aus Stahl** - ist ein zentrales Thema in vielen Mythen quer durch die Völker. Denn Schwerthansele wie Siegfried gibt es zuhauf in den Märchen und Sagen der Völker.
- Wir lernen überdies, daß Wagner, wie der überwiegende Teil der Menschheit auch heute noch, **keine Ahnung hatte** wie man gut **2000** Jahre lang mit Eisen und Stahl umging - denn Wagners Siegfried **schmilzt das Eisen und gießt das Schwert** - und das hat der reale Siegfried ganz sicher **nicht** gemacht.
- Und schließlich nehmen wir noch zur Kenntnis: Auch schon früher gab es dynamische Action-Stories mit ziemlich unwahrscheinlichen Handlungen. Und die Musik ist trotz hohen Alters viel besser als der Soundtrack zu "Star Wars" (und selbst ohne Megasonnd stellenweise genauso laut).
- Mehr - sehr viel mehr - zum Thema "**Eisen, Stahl und Schwerter**" findet sich im link

Psychologie und Materialwissenschaft

Die Seite ist als Anregung gedacht. Nachfolgend ein paar Beispiele aus meiner Wahrnehmung und Erinnerung. Alle Lernenden und Gelegenheitsbesucher sind eingeladen, am Aufbau dieser Seite mitzuwirken. Kommentare zu den Beispielen und eigene Beiträge sind willkommen.

Beiträge an: [H. Föll](#)

Advanced

Der **Gebrauchswert** eines Materials bemißt sich manchmal nicht nach seinen "objektiven" Eigenschaften, sondern nach seinem emotionalem oder psychologischem Wert für Menschen. Beispiele sind

- **Edelsteine**; insbesondere der Diamant. Künstliche Rubine oder andere Edelsteine, die man relativ leicht im Labor herstellen kann, haben keinen "Wert".
- Eine bestimmte **nichtrostende Stahlsorte**, obwohl viel billiger als Edelstahl, konnte sich am Markt nie durchsetzen. Ihre Rostfreiheit beruht auf einer passivierenden Oxidschicht - wie beim Aluminium. Nur, im Gegensatz zu **Al**, ist die Oxidschicht nicht farblos sondern rostrot - der Stahl sieht aus wie komplett verrostet. Erklärungen helfen nicht; niemand kauft das Zeug.
- Etwas subtiler ist die Psychologie bei den **Halbleitern**. Die Silizium Gemeinde (aus **Si** macht man Chips; aber es leuchtet nicht) und die Galliumarsenid Gemeinde (aus **GaAs** macht man Optoelektronik, z.B. Leuchtdioden und Laser **und** Chips - aber nur ganz einfache und trotzdem teure) sind recht sauberlich getrennte Gruppen - man bekennt sich zu dem einem Material oder zu dem anderen. Die **Si** - Fanatiker habe beispielsweise den schönen Spruch geprägt "**GaAs** ist das Material der Zukunft und wird es auch bleiben".
- **Magnesium** hat ein schlechtes "Image" - es brennt! Aber **Al** brennt auch; selbst Eisenpulver brennt ganz gut. Es muß nur ein bißchen heißer sein. Nur gab es mit **Mg** einige spektakuläre Unfälle in früheren Jahren. Als Resultat macht Audi schwer Werbung mit seiner **Al**-Karosserie, während Daimler-Benz eher schamhaft verschweigt, daß in den Sportwagen beträchtliche Mengen **Mg** eingebaut sind!
- **Verpackungskunststoffe** müssen eingefärbt werden - insbesondere die "recyclten". Niemand kauft Produkte in den grau-grünen Originalfarben - obwohl sie umweltschonender wären.

Übung 1.1-1

Der Hammerschlag



Fragenkomplex 1: Schlagen Sie (gedanklich müßte reichen) mit einem Hammer auf eine Reihe von (zunächst noch *homogenen*) Materialien (Camembert ist noch ausreichend homogen, nicht aber Schweizer Käse oder der PC).

- Wenn Sie Ihr Material *nach* dem Schlag anschauen, können Sie das, was jetzt vorliegt, im Vergleich vorher - nachher praktisch immer in *drei* Klassen einteilen. Überlegen Sie was das sein könnte?



Link zur [Lösung](#)



Fragenkomplex 2: Wenn wir jetzt statt mit dem Hammer herumzuschlagen einen einfachen *Zugversuch* machen, d.h. eine Normprobe einer konstanten *mechanischen Spannung* (= Kraft pro Fläche) aussetzen, kann man die obige Beobachtung erweitern und differenzieren, indem wir uns für *prototypische Materialien* überlegen :

- Wie *schnell* die *Verformung* (so nennen wir mal die "Antwort" des Materials auf das Einschalten der Spannung) der mechanischen Spannung folgt und ob ein stabiler Zustand erreicht wird.
- Wie die Verformung auf *Erhöhen* der mechanischen Spannung reagiert.
- Was passiert, wenn die mechanische Spannung wieder *ausgeschaltet* wird.
- Was passiert, wenn die Temperatur *erhöht oder erniedrigt* wird.



Suchen Sie sich Materialien, die prototypisch für die drei bereits gefundenen Verformungsklassen sind. Gehen Sie im Geiste mit jedem Prototyp-Material die obigen vier Punkte durch.

- Können Sie nachvollziehen, daß es im Spannungs - Verformungsdiagramm bis zu drei Bereiche gibt, die man mit den Begriffen: *Elastisch, Plastisch, Bruch* beschreibt?
- Haben Sie Materialien gefunden, bei denen die Verformung nach Anlegen der Kraft in makroskopischen Zeitdimensionen weiterläuft (also noch nach Sekunden oder Minuten die Probe sich *viskoelastisch* verändert)?
- Haben Sie Beispiele gefunden, bei denen die Temperatur das Verhalten stark beeinflusst?



Link zur [Lösung](#)



Fragenkomplex 3: Wir denken jetzt mal darüber nach, ob schon eine *einzig*e Materialsorte sich im Zugversuch ganz verschieden verhalten kann, wenn man "Kleinigkeiten" im inneren Aufbau (wir nennen das "*Gefüge*") ändert.

- .Fallen Ihnen Materialien ein, die zwar unter einem *Sammelbegriff* existieren (z.B. "Holz"), aber in ihren mechanischen Eigenschaften doch recht verschieden sind? (Tip: Denken Sie auch an mechanische Eigenschaften wie "Härte", Sprödigkeit", Elastizität,..)?
- Fallen Ihnen Materialien ein, die zwar *chemisch identisch* sind, aber in grundverschiedenen Erscheinungsformen vorkommen? (Tip: Denken Sie an etwas, was angeblich der beste Freund der Frauen ist).
- Fallen Ihnen Materialien ein, die durch Bearbeiten, kleine Zusätze von anderen Stoffen oder schlicht durch älter werden, ihre mechanischen Eigenschaften ändern?



Link zur [Lösung](#)

Übung 1.1-2

Elektrische Spannung anlegen



Legen Sie (z.B. mit einer Batterie) an eine Reihe von homogenen Materialien gedanklich eine elektrische Spannung an. (Ein Stück Metall oder Plastik ist noch ausreichend homogen, nicht aber "irgendend etwas", was zwei Anschlußdrähte hat, z.B. eine Leuchtstoffröhre oder ein Fernseher.

1. Fließt elektrischer Strom? Viel oder wenig?
2. Fällt Ihnen zur Klassifikation: "*Leiter*", "*Isolator*" und "*Halbleiter*" etwas ein? Kennen Sie dazu typische Materialbeispiele?
3. Haben Sie für ausgewählte Materialien ein Gefühl dafür, was bei *anderen Temperaturen* geschieht und warum?
4. Was *fließt* eigentlich? Fallen Ihnen Beispiele ein, wo Stromfluß nicht mit dem üblichen Fluß von ??? verbunden ist?
5. Haben Sie ein Gefühl dafür - analog zum Zugversuchsexperiment - was passiert wenn man die Spannung immer mehr steigert?
6. Überlegen Sie, was im mechanischen Zugversuch passiert, wenn sie zwei verschiedene, aber solide verbundenen (z.B. verschweißte) Materialien mit mechanischer Spannung verschiedenen Vorzeichens belasten (Zug und Druck)?
Haben Sie auch ein Gefühl dafür, was im ähnlichen Fall bei elektrischer Spannung passiert?
7. Ist Ihnen klar, daß in der letzten Frage das "Herzstück" der kompletten Halbleitertechnologie steckt?



Link zur [Lösung](#)

Übung 1.1-3

Geschichte und Materialwissenschaft



Fallen Ihnen weitere Höhepunkte der historischen Entwicklung der Materialwissenschaft ein? Oder haben Sie Vermutungen?

- Schreiben Sie Stichwörter auf.
- Sammeln Sie dazu "Input" im Laufe des Semester durch geschärfte Wahrnehmung Ihrer Umwelt und der vorhandenen Informationsflut
- Stellen Sie Ihre Erkenntnisse zusammen und schicken Sie per e-mail an den Dozent. Ob ein interessanter Fund dabei war, können Sie am Auftauchen Ihres Stichwortes in der Tabelle: ["Historische Entwicklung der Materialwissenschaft"](#) erkennen.



e-mail an [H. Föll](#)

Übung 1.1-4

Medien und Materialwissenschaft

- Finden Sie leicht erkennbare Fehlleistungen in Medien zur Thematik (Natur)wissenschaft und Technik. Einige Hinweise zur Suche:
 - Falsche Übersetzungen.
 - Falsche Maßeinheiten.
 - Falsche Zahlen. Als Arbeitshypothese kann man annehmen, daß Zahlen mit ungewöhnlichen Maßeinheiten ("Lichtjahre", Volt, ..) und Zahlen **< 0,01** und **> 1.000.000** eher falsch als richtig sind.
- Nie wird jedoch der deutsche Kulturschaffende z.B. *romanisch* mit *romantisch* verwechseln.
- Nachfolgend **zwei** Beispiele

**Mikrochip als
Arzneidepot im Körper**

Er ist kleiner als zwei Millimeter, enthält 34 Kammern, ist mit Gold überzogen und funktioniert elektrochemisch. Ein neuer Mikrochip aus Silikon kann – je nach Bedarf – pro Kammer eine Chemikalie oder ein Arzneimittel abgeben. Wie amerikanische Wissenschaftler in der Zeitschrift *Nature* (Bd. 397, S. 335, 1999) berichten, entläßt der Silikonchip die Substanzen nach einem elektrischen Signal aus den Kammern. Dabei wirkt die Goldmembran als Anode eines Stromkreises und löst sich elektrochemisch auf. Versorgt mit einem Speicher, einer Mikrobatterie und mehreren kleinen Stromkreisen könnte der Winzling verschiedene Substanzen gleichzeitig oder nacheinander abgeben – und sowohl im Körper als Medikamentendepot, als auch im Labor für chemische Analysen genutzt werden. sag

Süddeutsche Zeitung Nr. 37 / Seite V2/13 Dienstag, 15. Februar 2000

DIE COMPUTERSEITE

Streicheleinheiten vom elektronischen Pfleger

Roboter in der Altenpflege leisten noch wenig, kosten viel und haben ein Herz aus Silikon

Unsere Gesellschaft wird im 21. Jahrhundert vielleicht auf intelligente Menschen verzichten können, aber nicht auf "wente Dinge", sagt Norbert Holz. Institut für De- rogerität Essen

Touch-Screen sehen kann. Care-a-bot be- stellt auch die Arzneien in der Apotheke. Was aber macht der clevere Butler, wenn unvorhergesehene Dinge passieren? Der Roboter r intelligent

gestützte Daheim e.V. empfand es als ei- nen grausamen Gedanken, Roboter in der Altenpflege einzusetzen. Für Dröge geht diese Art Entwicklung an der Realität und den Bedürfnissen vorbei. Denn: gerad- rater etwa Alz-



Die schönsten Beispiel bitte weitergeben; Nachricht an [H. Föll](#)

Mögliche Antworten zu den Fragen in Übung 1.1-1

Der Hammerschlag

Illustration

Fragenkomplex 1: Schlagen Sie (gedanklich müßte reichen) mit einem Hammer auf eine Reihe von (zunächst noch homogenen) Materialien (Camembert ist noch ausreichend homogen, nicht aber Schweizer Käse oder der PC). Was passiert?

Im wesentlichen wird die Form des Materials **nach** dem Hammerschlag in eine der folgenden drei Kategorien fallen:

- Die Form hat sich **nicht geändert** (oder nur ganz wenig). Zum Beispiel bei einem Stück Gummi oder Stahl. Wir haben **elastische Verformung**.
- Die Form hat **deutlich geändert**, aber das Material ist ganz (in einem Stück) geblieben. Zum Beispiel bei einem Stück Blei oder bei einem Camembert. Wir haben **plastische Verformung**.
- Die Form ist nicht mehr vorhanden, weil das Material **gebrochen** ist (z.B. Glas). Wir haben den **Bruch**. Setzt man die Stücke (gedanklich) exakt zusammen, wird die wiederhergestellte Form in eine der beiden obigen Kategorien fallen.

Lösung 2:

Prototypische Materialien könnten z.B. sein:

- Spröde** Materialien (zumindest bei Raumtemperatur): Glas, Diamant, Silizium, Gußeisen, "harte" Kunststoffe,...
- Viskose weiche** Materialien: Honig, Stechkäse, Camembert, Wachs, Seife, Schaumgummi,...
- "Duktile"** Materialien (nicht weich, aber formbar): Blei, Aluminium, ... (fast alle Metalle), viele Kunststoffe.

Wie schnell folgt die Verformung der Kraft?

- In fast allen Fällen (außer bei "viskosen" Materialien) **ziemlich schnell**: Zieht man schlagartig am Material (Plötzliches Einschalten der Kraft), wird das Material sofort etwas länger: Es dehnt sich, wir messen eine **Dehnung**. Bei einer bestimmten Längenänderung oder eben Dehnung bleibt es stehen; läßt man los (Ausschalten der Kraft) geht die Dehnung sofort wieder zurück.
- Bei "viskosen" oder **viskoelektischen** Materialien geht nach Einschalten der Kraft die Verformung längere Zeit weiter; auch beim Abschalten wird die Rückverformung einige Zeit brauchen. Extrembeispiel: Honig oder Streichkäse "verfließt" so allmählich unter der Wirkung seines eigenen Gewichts.

Wie reagiert das bereits belastete Material auf Erhöhen der angelegten Kraft?

- Früher oder später wird es brechen. Immer! (Ein Faktum, das im Spaß gelegentlich als 1. Hauptsatz der Materialwissenschaft bezeichnet wird: **Mit Gewalt geht alles kaputt**).
- Vorher aber geschieht bei allen duktilen Materialien etwas anderes: Bei irgendeiner (materialspezifischen) mechanischen **Spannung** (= Kraft pro Fläche) wird nach Wegnehmen der Kraft nicht mehr der Ausgangszustand erreicht, sondern die Probe wird jetzt länger sein als vorher.

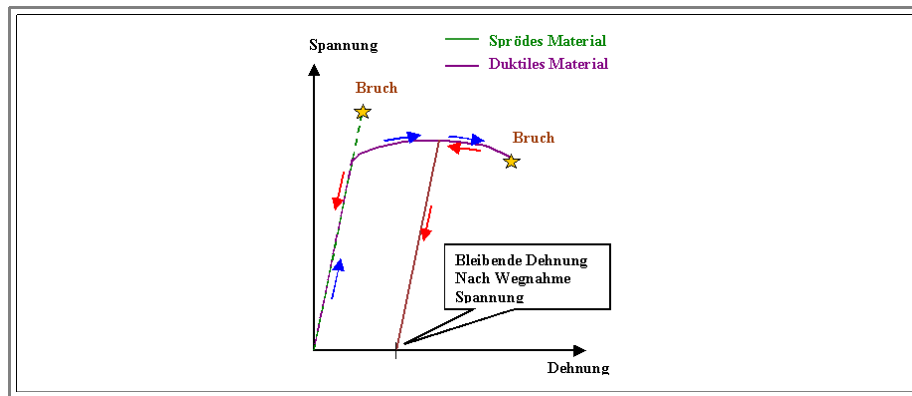
Was passiert bei Änderungen der Temperatur?

- Tendenziell wird alles "weicher" wenn wir die Temperatur erhöhen. Man denke an den Schmied mit seinem rotglühenden Eisen, an Plastik, das versehentlich auf die Herdplatte zu liegen kam, an den Glasbläser.
- Wie es sich herausstellen wird, gibt es **eine** Ausnahme von dieser Regel; aber diese Ausnahme, obwohl bei sehr gebräuchlichen Materialien (Gummi!) vorliegend, entzieht sich der normalen Erfahrung.

Können Sie nachvollziehen, daß es im Spannungs - Verformungsdiagramm bis zu drei Bereiche gibt, die man mit den Begriffen: **Elastisch, Plastisch, Bruch** beschreibt?

- Einen (möglicherweise sehr kleinen) elastischen Bereich und den Bruch muß es immer geben. Denn auch spröde Materialien brechen erfahrungsgemäß **nicht sofort**, d.h. bei kleinsten Kräften, aber alle Materialien brechen **immer**.
- Die Frage ist also, ob man auf einer beliebigen "**Spannungs - Dehnungs-Kurve**" (s.u.) nach einem elastischen Bereich gleich beim **Bruch** "landet", oder ob es einen plastischen Zwischenbereich gibt.
- Beim Abschalten der Kraft landet man wieder am Ausgangspunkt; das Material ist unverformt, sein Verhalten **elastisch**.

- Beim Abschalten der Kraft landet man - nach Abzug des elastischen Anteils der Verformung - bei einer bleibenden Verformung (= Längenänderung im Zugversuch), das Verhalten ist **plastisch**.
- Das könnte etwa so aussehen



Lösung 3: Es gibt hier viele Beispiele, auch für Alltagsmaterialien, aber im Gegensatz zu Eigenschaften wie "spröde" oder "weich", hat man in der Regel kein Gefühl dafür.

- Sammelbegriffe sind z.B.:
Glas: Fensterglas, Sicherheitsglas, Glaskeramik: Im Verhalten sehr unterschiedlich.
Kunststoff: Enorme Variationsbreite, auch noch innerhalb einer Sorte.
Stahl: Große Unterschiede zwischen Baustahl, rostfreiem Stahl, Werkzeugstahl etc.
- Am wichtigsten und am erstaunlichsten: Der **Kohlenstoff!**
 Gibt es als (weichen) **Graphit**, als ultraharten **Diamant**, als rei- aber nicht scherfeste **Carbonfaser**, als "**Fulleren**", als glasartiges sehr widerstandsfähiges (amorphes) Material (das schwarze Zeug, das man kaum mehr aus der Backröhre bekommt),
- Auch noch bekannt: **Quarz**, als Bergkristall oder als Quarzglas (im Kaminofen) recht verschieden.
- Eigentlich kann man hier fast alles reinschreiben! Aber je ein Beispiel:
Bearbeiten: Siegfried schmiedet sein Schwert. Warum eigentlich? Wieso nimmt er es nicht so wie "gegossen"?
Zusätze: Alle Legierungen beruhen auf diesem Prinzip: Schönes Beispiel: Die Getränkedose aus Aluminium mit ein bißchen was von diesem und jenem.
Älter werden: Beispiele sind Risse in den "austenitischen Stählen" der Rohrleitungen in den Kernkraftwerken, die Kongresshalle in Berlin, die plötzlich einstürzte (Stichwort: "**Materialermüdung**").

Mögliche Antworten zu den Fragen in Übung 1.1-2

Elektrische Spannung anlegen

Illustration

Legen Sie (z.B. mit einer Batterie) an eine Reihe von homogenen Materialien gedanklich eine elektrische Spannung an. (Ein Stück Metall oder Plastik ist noch ausreichend homogen, nicht aber "irgendend etwas", was zwei Anschlußdrähte hat, z.B. eine Leuchtstoffröhre oder ein Fernseher.

1. Alles kommt vor. Viel Strom fließt bei elektrischen Leitern, wenig bei Isolatoren. Dabei beträgt die Spanne zwischen viel und wenig - je nach Material - leicht **20** Größenordnungen.
2. **Leiter** Viel Strom bei wenig Spannung.
Alle Metalle und einige "Exoten", z.B. leitende Polymere und Keramiken.
Aber auch: Manche Flüssigkeiten ("Elektrolyte")
Isolatoren: Kaum Strom (praktisch nicht meßbar); auch nicht bei hoher Spannung.
Fast alle Keramiken, Kunststoffe, viele Naturstoffe (vom Holz bis zu Mineralien)
Halbleiter: Wenig Strom, aber gut meßbar, bei vielen Spannungen.
Sehr viele Materialien, aber nur in fast perfekten "Gefügen" beobachtbar. Prominentestes Beispiel ist Silizium (**Si**) und Galliumarsenid (**GaAs**)
3. **Metalle**: Leitfähigkeit sinkt mit steigender Temperatur.
Halbleiter: Leitfähigkeit steigt massiv mit steigender Temperatur
Manche **Keramiken**: Leitfähigkeit setzt plötzlich ein bei höherer Temperatur
Supraleiter: Leitfähigkeit geht bei tiefer Temperatur schlagartig auf Unendlich (Widerstand = **0** Ω).
4. In der Regel fließen **Elektronen** (z.B. in Metallen).
Manchmal aber auch **Ionen** (geladenen Atome), z.B. in allen leitenden Flüssigkeiten oder in Ionenleitern (spezielle Festkörper). Dann ist Strom auch immer mit der Bewegung von Atomen verbunden.
Auch in Gasentladungsröhren ("Neonröhre, Leuchtstoffröhre") fließen Ionen.
In Supraleitern sind es **Elektronenpaare**, die durch ganz besondere Kräfte zusammengehalten werden.
In Halbleitern fließen neben Elektronen auch Elektronenfehlstellen; **Löcher** genannt (ähnlich zu einem unbesetzten Platz im sonst vollen Kino: Es ist einfacher die Bewegung der Fehlstelle zu beschreiben (sie bewegt sich indem ein Nachbar hineinrutscht), als die Bewegung der vielen Leute, die nacheinander hineinrutschen).
Löcher benehmen sich wie positiv geladene Elektronen.
5. In der Regel steigt der Strom. Bei hohen Stromdichten wird's warm. Bei extrem hohen Stromdichten (wie sie in integrierten Schaltungen vorkommen) bewegen sich in den Al-Leiterbahnen auch Atome mit - die Bahn geht kaputt.
Bei extremem Spannungen - materialabhängig - knallt's! Auch in Isolatoren.
6. **Mechanisch** wird nicht viel passieren, das "Verbundmaterial" wird in seinem Verhalten irgendwie zwischem dem Verhalten der beiden Teilmaterialien liegen.
Elektrisch wird es im Wortsinn spannend : Ein "Kontakt" zwischen Metall und Halbleiter, Halbleiter und Halbleiter, Metall und Ionenleiter, usw, zeigt häufig ein komplett anderes Verhalten als die Ausgangsmaterialien. Bei den ersten zwei Beispielen entsteht häufig eine "**Diode**": Strom fließt nur in eine Richtung. Vertauschen der Spannungspole produziert nur noch einen winzigen "Leckstrom" im Kontakt, während beim Ausgangsmaterial die Polung keine Rolle spielt.
7. Auf diesem "Gleichrichtereffekt" beruht die komplette Mikroelektronik! Man spricht vom **p-n-Kontakt** wenn zwei verschiedene Halbleiter Diodenverhalten zeigen; vom Schottky-Kontakt wenn der Effekt beim Halbleiter - Metall Kontakt erfolgt.

Historische Entwicklung der Materialwissenschaft

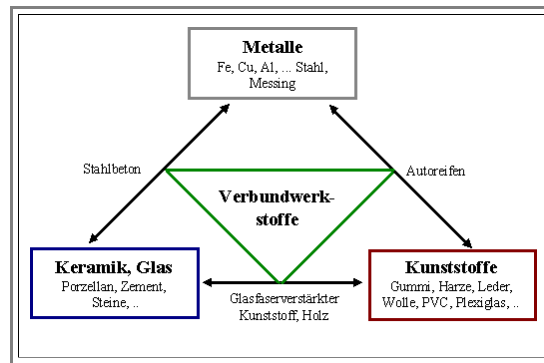
 Historische Entwicklung der Materialbeherrschung des Menschen - ein grober und subjektiver Überblick

Illustration

Von der Werkstoffkunde ("Trial and Error", Überlieferung)	zur	Materialwissenschaft (gezieltes Vorgehen, theoretisches Verständnis)
Stein, Holz, Knochen	100.000 v.C	
Keramik	6.000 v.C.	
Bronze (Cu + Sn)	3.000 v.C.	
Glas	2.000 v.C.	
Eisen	1.500 v.C.	
	1.000 v.C.	Atomhypothese
Porzellan	700 n.C.	
Stahl, Gußeisen	1.500 n.C.	
Beton (wiederentdeckt)	1850 n.C.	
	1850 n.C.	Chemische Synthese
	1866 n.C.	Al - Elektrolyse
	1930 n.C.	Al - Legierungen; Rostfreier Stahl
	1940 n.C.	Kunststoffe
	1960 n.C.	Ti -Legierungen
	1955 n.C.	Halbleiter
	1997 n.C.	Blauer Festkörperlaser (GaN)
	2000 n.C.	1 Gbit -Speicher; Zähe Keramik?

"Technische" Materialklassifikation

Wenn man die Naturstoffe als eigene Kategorie weglässt und dafür Kunststoffe einführt, entsteht die gezeigte Struktur, die vielleicht etwas klarer ist als die im Rückgrat gezeigte. Wiederum aber sind moderne Materialien nicht richtig erkennbar.



Illustration

"Chemische" Materialklassifikation

Illustration

Wenn man etwas wissenschaftlicher vorgeht, und die Art der **Bindungen** zwischen den Atomen sowie die Art der Packung der Atome des Materials in den Vordergrund stellt, erhält man die nachfolgende Systematik:

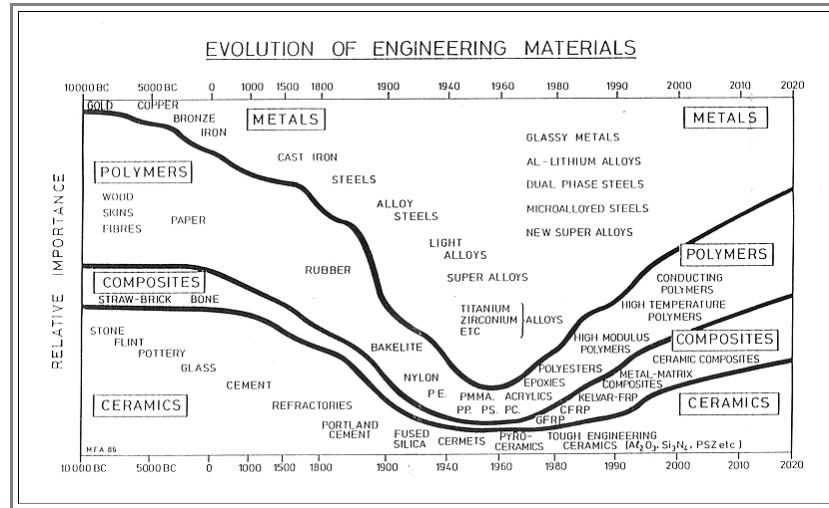
	Bindungsart(en)	Bausteine des Materials	Packung
Metalle	metallisch	Atome	kristallin
Halbleiter	kovalent, (ionisch)	Atome	kristallin, (selten amorph)
Keramik	kovalent, ionisch	Moleküle	kristallin
Gläser	kovalent, ionisch	Moleküle	amorph
Kunststoffe	kovalent, sekundäre Bindungen	Molekülketten	amorph, (selten kristallin)

Sie ist zweifellos viel systematischer als die anderen Einteilungen, hat aber auch noch genügend Überlappungen und setzt viel Wissen voraus, das erst noch erarbeitet werden muß.

Evolution von technischen Materialien

Mensch sein heißt, Materialien für "technische" Zwecke zu benutzen. Schaut man sich mal die Evolution der benutzten [Materialklassen](#) an, ergibt sich folgendes (von einem mir leider unbekannten Kollegen zusammengestelltes) Bild:

- Die Skala "Relative Wichtigkeit" ist natürlich völlig subjektiv; aber es kann sich ja jeder selbst überlegen, wie er oder sie die Gewichtung verteilen würde.

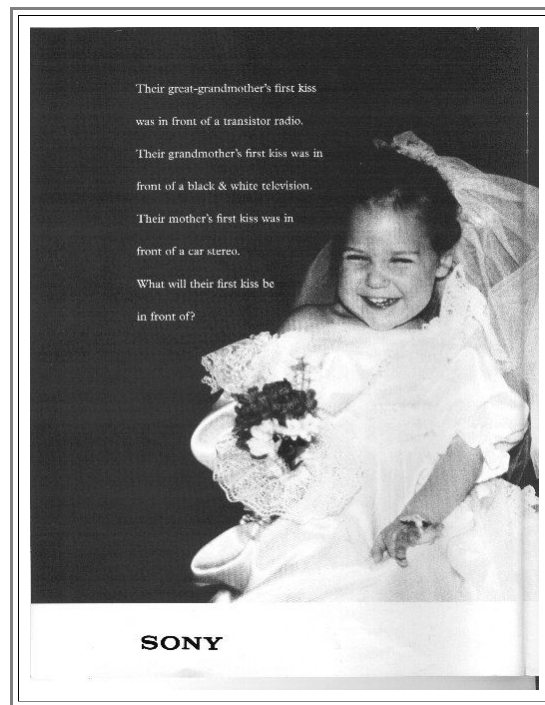


- Wie man sieht hat die "[Erfindung](#)" der Metalle über Jahrtausende hinweg die Naturwerkstoffe weitgehend verdrängt.
 - Aber nach dem 2. Weltkrieg wendet sich das Blatt. Polymere (auch und vor allem in Textilien), Verbundwerkstoffe und Keramiken gewinnen rasch an Bedeutung. Es ist kein Zufall, dass parallel die Materialwissenschaft entsteht
- Die Graphik ist leider schon etwas älter: Sie enthält noch nicht die **Halbleiter**, die eigentlich heutzutage mindestens so wichtig sind wie die Verbundwerkstoffe. Persönlich würde ich für **Si** und Kollegen im Jahre **2003** mindestens **1/4** der Ordinate vergeben.

Der Mensch ist vergesslich

Illustration

- Der werbetreibende Mensch, der sogenannte **Kreative**, hat nicht nur häufig ein berufsbedingt gestörtes Verhältnis zur allgemeinen Wahrheit, sondern ist auch großzügig bei historischen Dingen.
- Unten der linke Teil einer zweiseitigen Anzeig von **SONY** die ca. **1998** in allen besseren amerikanischen Magazinen erschien. Wenn man unterstellt, daß auch Leute von SONY vor der Veröffentlichung mal draufschaun, demonstriert das sehr schön, daß die wirklich fundamentalen Umwälzungen im **20.** Jahrhundert bei den "Kreativen" und anderen Geistesschaffenden keinen sehr tiefen Eindruck hinterlassen haben.
- Die "great-grandmother" lebte so ungefähr **3 x 30 = 90** Jahre früher, d.h. so **1910 - 1920**.
- Daß die Quantentheorie, die Basis der **Transistoren**, noch gar nicht so recht erfunden war, muß man als lästiges Detail sehen. Der Transistor selbst wurde erst **1947** von John **Bardeen**, Walter **Brattain** und William **Shockley** erfunden! Transistorradios gab es im übrigen erst ab ca. **1960**. Im übrigen hat die great-grandmother überhaupt nicht Radio gehört, das gab es nämlich noch gar nicht.
- Die "grandmother" hat ihren ersten Kuß so um **1940** auch kaum vor dem **schwarz-weiß Fernseher** genossen. Den gab es zwar gerade eben, aber weit verbreitet war er noch nicht.
- Ob die Mutter so vor **20 - 30** Jahren beim Küssen im Auto das **Stereoradio** an hatte, mag sein; das war damals schon eingeführt.
- Das Farbfernsehen war wohl nicht so eindrucksvoll - und **Röhren**, so scheint es, haben im Bewußtsein der Kreativen wohl nie existiert.



Alltägliche Materialeigenschaften und Materialwissenschaft

■ Hier eine schelle (und sicherlich unvollständige) Liste, die wohl jeder iund jede aufstellen könnte:

Illustration

■ **Mechanische Eigenschaften** (alle als Funktion der Temperatur, des Gefüges,...)

- Dichte
- Elastizität
- Festigkeit
- Härte
- Nachgiebigkeit (Duktilität)
- Sprödigkeit

■ **Physikalische (nichtmechanische) Eigenschaften** (als Funktion der Temperatur, Frequenz, ...)

- Elektrische Leitfähigkeit
- Dielektrizitätskonstante
- Magnetische Besonderheiten
- Optische Eigenschaften, z.B. Brechungsindex
- Thermisches Verhalten (Schmelzpunkt, Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität...)
- Kerntechnische Eigenschaften (Radioaktivität, Wirkungsquerschnitte,...)

■ **Oberfläche ("Chemische Eigenschaften")**

- Korrosion, Oxidation
- Abrieb, Verschleiß
- Ästhetik ("Anmutung"), Sauberkeit

■ **Herstellung, Bearbeitung, Technologie**

- Gewinnung, Aufbereitung
- Verarbeitung
- Verfügen, Verbinden, Dünnschichttechnik,...


■ **Ökonomie**

- Verfügbarkeit, Transport
- Kosten auf allen Ebenen, Wertschöpfung
- Image, Marktposition

■ **Ökologie**

- Recyclingfähigkeit, -Techniken
- Gefahrpotentiale
- Umweltbelastung, Entsorgung

Berechneter Akku

 Nachfolgend ein Artikel aus der Süddeutschen vom Okt. 1998 zum Thema **Batterien und Akkus**. Man beachte den markierten letzten Absatz.

Illustration

Batterien mit schlechter Bilanz

Der mühsame Weg, die Qualität der Energiespeicher zu verbessern

Fast eine Milliarde Batterien kaufen die Deutschen jedes Jahr, um ihre Wecker ticken zu lassen, Funktelefone und Walkmen mit Strom zu versorgen oder per Hörgerät den Kontakt zur Außenwelt wiederherzustellen. Bei einem Blick ins Innere der Energiepakete entpuppen sie sich allerdings als Sammelsurien giftiger Metalle wie Zink, oft auch Cadmium oder Quecksilber.

Der Normalbürger entsorgt den Sondermüll zumeist wie Bananenschalen und Kaffeefilter: Er wirft ihn zu den Hausabfällen. Eine neue Verordnung soll den Zustand verbessern. Seit dem 1. Oktober müssen die Verbraucher ihre Batterien an Sammelstellen in den Geschäften abgeben. Diese werden in Sortierzentren nach Typ und Inhalt getrennt, dann gelagert oder wiederverwertet.

Alkali-Mangan ist besser

Über drei Viertel der heute verkauften Batterien sind sogenannte Zink-Kohle- oder Alkali-Mangan-Systeme. Bei beiden reagieren Elektroden aus Zink und Mangandioxid miteinander. Sie unterscheiden sich in ihrem Elektrolyten - der leitenden Flüssigkeit, in welche die Elektroden getaucht sind.

Daß die Varianten die Umwelt unterschiedlich stark belasten, zeigte kürzlich eine Prüfung von 17 "Mignon-Batterien" durch das Umweltmagazin Ökotest (Nr. 5, S. 46, 1998). Die runden, etwa fünf Zentimeter langen Mignonzellen erkennt man an den aufgedruckten Kürzeln "LR6" oder "AA". Die Tester empfahlen sechs Batterien, ausschließlich Alkali-Mangan-Systeme. Sie kosten rund zwei Mark das Stück, enthalten weder Blei noch Cadmium oder Quecksilber und liefern auch am meisten Strom. Die Zink-Kohle-Speicher sind zwar erheblich billiger, sie machen jedoch schon nach einem Viertel der Zeit schlapp. Außerdem fanden sich in allen "beachtliche" Mengen Blei, so Ökotest. Mit dem Urteil "nicht empfehlenswert" tadelten die Prüfer die "Power Metal Jacket Batteries" des Anbieters Conrad Electronic. Das Billigprodukt aus China lief beim Test aus, enthielt enorme Dosen gefährlicher Schwermetalle aber praktisch keine Energie.

Ob Blei belastet oder nicht, eine Schwäche bleibt allen nicht wiederaufladbaren Batterien: eine katastrophale Energiebilanz. Wie das Freiburger Institut für

ließ sich nicht mehr aufladen.

Die umweltfreundlichsten Speicher sind - im Prinzip - die **Akkumulatoren**. Sie sind so aufgebaut, daß sich die chemischen Reaktionen an den Elektroden umkehren lassen. Mit einem Ladegerät lassen sie sich fast beliebig oft in den Urzustand zurückversetzen, versprechen die Anbieter.

In der Praxis leiden zumindest die Nickel-Cadmium-Akkumulatoren - Weltmarktanteil 1996: 75 Prozent - unter dem "Memoryeffekt". Lädt man die Akkus auf, bevor sie vollständig leer sind, kann sich an der negativen Elektrode eine Schicht aus Cadmiumkristallen bilden. Im nächsten Zyklus läßt sich der Speicher dann nur noch bis zu diesem Punkt entladen - dementsprechend sinkt die nutzbare Energiemenge mit der Zeit stetig ab.

Als System der Zukunft gilt unter Experten der Lithium-Ionen-Akkumulator. Der Name verweist auf den Elektrolyten: Dieser enthält Lithiumatome, die sich bei Betrieb in das Kohlenstoffgitter der negativen Elektrode einlagern und dort ein Elektron abgeben. Die Batterien speichern heute pro Kilogramm Material rund 1000 Wattstunden - dreimal soviel wie die Nickel-Cadmium Variante. Nach einer Prognose des Batterieherstellers Varta wird ihr Weltmarktanteil bis zum Jahre 2000 auf 25 Prozent steigen. Chancen dürften sie vor allem bei Geräten mit hohem Energieverbrauch haben: bei Mobiltelefonen, Digitalkameras oder Notebooks. Die Schwachstelle der Lithium-Ionen-Akkus ist heute ihr hoher Preis. Sie kosten noch rund viermal soviel wie Nickel-Cadmium-Speicher, hauptsächlich wegen des teuren Cobalts in der positiven Elektrode. Die Hersteller versuchen deshalb, das seltene Element durch Nickel oder Mangan zu ersetzen.

Beimischung bringt mehr Strom

Von zwei anderen, erfolversprechenden Varianten berichteten in letzter Zeit amerikanische Forscher: Jaekook Kim und Arumugam Manthiram von der Universität Texas in Austin mischten ihrer Mangan-Verbindung noch Iod und Natrium bei. Sie erhielten so eine amorphe Elektrode, in der die Atome nicht mehr in einem regelmäßigen Gitter angeordnet waren. (Nature, Bd. 390, S. 265, 1997). Die neue Zelle soll mehr Strom als herkömmliche Cobalt-Zellen liefern und zudem bei häufigem Aufladen stabil bleiben.

Umweltchemie 1996 ausrechnete, kommen auf jede Wattstunde Strom, die in einem Alkali-Mignon-System gespeichert ist, rund 600 Wattstunden verbrauchte Energie in der Produktion. Bei Strom aus der Steckdose beträgt das Verhältnis eins zu drei. Etwas günstiger ist die Bilanz neuartiger Batterien, die sich mit einem speziellen Ladegerät etwa 25mal "auffrischen" lassen. Das Umweltbundesamt empfiehlt sie als umweltschonende Variante. Allerdings deckten die Ökotox-Prüfer Kinderkrankheiten auf: Das Laden funktionierte wohl in einem frühen Stadium, als nur ein Fünftel der gespeicherten Energie verbraucht war. Zapften die Tester jedoch vor dem Laden größere Mengen Strom, fiel die Leistung des Energiespenders schnell ab. Teilweise wurde er nach neunmaligem Auffrischen überlastet und

Die Gruppe um Gerd Ceder vom Massachusetts Institute of Technology experimentierte mit Aluminium - im Gegensatz zu Cobalt, Mangan oder Nickel kein Übergangsmetall. Die Batteriespannung stieg durch das billige Element auf 4,4 Volt - herkömmliche Lithium-Ionen-Batterien erreichen lediglich 3,6 Volt (Nature, Bd. 392, S. 694, 1998). Wichtiger als das Ergebnis war dabei die Methode:

Die Forscher hatten die Eigenschaften der Aluminium-Elektrode erst berechnet und dann experimentell bestätigt. Bisher entdeckte man neu Mischungen meist durch - mehr oder minder gezieltes - Ausprobieren. Die Entwicklung neuer Batterien könnte künftig zielstrebig ablaufen als bisher, prophezeit Ceder.

STEFAN GRESCHIK Aus der SZ (Okt. 98)

Simulation Kristallbildung

- Hier kann die Bildung eines zweidimensionalen Kristalls simuliert werden. .
 - Die Atombewegungen werden unter Berücksichtigung des [Lennard-Jones-Potentials](#) in einer "**Monte-Carlo-Simulation**" berechnet.
- Viel Parameter können vorgewählt und während der Simulation geändert werden.
 - Es lohnt sich ein bißchen zu spielen!

Advanced

Zugehörige Quelldateien:

- Simulationshauptprogramm und Simulationklasse ([simulation.java](#))
- Klassen für Darstellung auf dem Bildschirm ([viewport2D.java](#) mit [wKoord.java](#) und [sKoord.java](#))

Paradigms Lost

von John L. Casti

Advanced








- Der Titel des Buches (1989 erschienen) ist ein Wortspiel zu "*Paradise Lost*", ein Drama von John **Milton** (1608 - 1674), das zur englischen Hochliteratur zählt.
- Das Wort "paradigm", zu deutsch *Paradigma* (= *Muster, Modell*), verweist auf die Wissenschaftstheorie von **Kuhn** (1922 -), der 1962 mit seinem Buch "*The Structure of Scientific Revolutions*" ein Standardwerk der Wissenschaftsphilosophie und -geschichte schrieb.
- Das heute viel gebrauchte Wort "**Paradigma**" hat die Bedeutung von beispielhaften Problemlösungen in einem Wissenschaftsgebiet, die universell (in einem Akt des Glaubens) auch auf bisher ungeklärte Fragen übertragen werden. Fortschritt, auch in den Naturwissenschaften, findet nach Kuhn nur statt, indem alte Paradigmen in einem revolutionären Akt, gegen den erbitterten Widerstand der Altdenker, durch neue ersetzt werden. Ein schönes Beispiel dafür ist der Paradigmenwechsel vom Kontinuum zu den Atomen, der **Boltzmann** das Leben kostete.
- John Casti** - ein (amerikanischer) Mathematik-Professor in Wien und bekannter Autor allgemeinverständlicher Bücher, greift in "Paradigms Lost" einige Wissenschaftsgebiete auf, die ihr Paradigma verloren haben, oder nie ein universal akzeptiertes Paradigma hatten.
- In anderen Worten, er beschäftigt sich mit den großen offenen Fragen der Wissenschaft. Dabei behandelt er den jeweiligen Gegenstand als Gegenüberstellung der wichtigsten konkurrierenden Theorien; ganz zum Schluß fällt er sein persönliches Urteil. Die Kapitel sind für sich lesbar, allgemeinverständlich (ohne Mathematik) geschrieben und teilweise spannend erzählt. Vom ersten Kapitel abgesehen, beschäftigen sich alle folgenden Kapitel mit einer der behandelten offenen Fragen, es sind dies
- Die Kapitel sind für sich lesbar, allgemeinverständlich (ohne Mathematik) geschrieben und teilweise spannend erzählt. Vom ersten Kapitel abgesehen, beschäftigen sich alle folgenden Kapitel mit einer der behandelten offenen Fragen, es sind dies:
- Faith, Hope, and Asperity - Belief Systems, Science and the Invention of Reality*
Spannend zu lesen, wenn man mal genau wissen will, wie man Wissenschaft (z.B. Astronomie, Evolutionstheorie, Physiologie usw.) von den Pseudowissenschaften (Astrologie, Schöpfungs"theorie", Homöopathie usw.) unterscheiden kann.
- A Warm Little Pond*
Wie entstand Leben? Aus der Ursuppe in einem letztlich physikalischen Prozeß oder durch unbekannte Einflüsse?
- It's in the Genes*
Verhalten: Antrainiert oder ererbt?
- Speaking for Myself*
Wie entstand Sprache?
- The Cognitive Engine*
Können Computer jemals denken?
- Where are They?*
Gibt es außerirdisches Leben?
- How Real is the "Real World"?*
Sagt die Quantentheorie wirklich, daß es keine objektive Realität gibt ohne Beobachter (Ist der Mond da, wenn niemand hinschaut)?
- Das letzte Kapitel interessiert uns besonders. Die ganze Problematik der Interpretation der Quantentheorie ist hier detailliert, genau und trotzdem verständlich dargestellt.
- 11 Jahre später hat J. Casti das Buch "Paradigms regained" herausgebracht, in dem die obigen Themen aus "neuer" Sicht wieder aufgenommen werden.
- Es spricht für den rapiden Fortschritt in der Wissenschaft, daß 11 zusätzliche Jahre nicht nur <260 Seiten zur Beschreibung brauchen, sondern Casti's Urteil sich teilweise geändert hat - insbesondere zum Thema "Quantentheorie"!

- John Casti hat noch andere Bücher ähnlicher Bauart geschrieben. Eines heißt "*Searching for Certainty - What Scientists can know about the Future*" und behandelt Themen wie "Können wir (irgendwann im Prinzip) das Wetter, die Börsenkurse, Krieg und Frieden, alle wahren Theoreme der Mathematik,... voraussagen?"
- Auch dieses Buch ist unterhaltsam und mit Gewinn zu lesen.
- Weitere Bücher zu den eher philosophischen und trotzdem hochinteressanten Problemen, die die Quantentheorie aufwirft, finden sich in den Links
- ["Schrödingers Katze"](#)
 - [Bücher zur Quantentheorie](#)











Bücher zur Quantentheorie

Harte Physik (aber noch für Anfänger geeignet)

Advanced

-  **Gerthsen, Kneser, Vogel; Physik** (Springer Verlag, 16. Auflage)
 -  Das Standardlehrbuch für die Experimentalphysik im Grundstudium. Wer den Inhalt beherrscht, kann aber fast schon promovieren.
 -  Hat sich im Laufe der Zeit zu einem außerordentlich brauchbaren Nachschlagewerk für *fertige* Physiker entwickelt. Das kurze Kapitel über Quantenmechanik gibt in sehr schöner Prägnanz die Grundlagen des mathematischen Apparats und die wichtigsten Ergebnisse. Die beste Kurzdarstellung für alle, die nur mal auf den Geschmack kommen wollen.
-  **Allonso, Finn; Physik III (Quantenphysik und statistische Physik)**(Intereuropean Editions)
 -  Eines von vielen Standardlehrbüchern die auf Einsteigerniveau die Quantentheorie abhandeln. Ausführlich und verständlich geschrieben.
-  **Haken, Wolf; Atom- und Quantenphysik** (Springer)
 -  Sehr schönes sorgfältig gemachtes Buch. In der 6. Auflage.

Allgemeinverständlich bis ziemlich verrückt

-  Hier zunächst mal Links zu irgendwo in den Hyperskripten näher besprochenen Büchern
 -  **Casti**, John L.; [Paradigms Lost](#)
 -  **Penrose**, Roger; [The Emperor's New Mind](#) and **Shadows of the Mind**
 -  **Feynman**, Richard; [Lectures of Physics](#) - allerdings ist Band III zur Quantentheorie nicht so ganz einfach. Die ersten paar Kapitel sind aber nicht schlecht um die "Denke" der QT besser zu verstehen.
-  **Feynman**, Richard; **QED - The Strange Theory of Light and Matter**, (Princeton Science Library).
 -  Das Büchlein ist die gedruckte Version von vier Vorträgen über Quantenelektrodynamik, die Feynman für Laien konzipierte.
 -  Es ist sehr leicht zu lesen und gibt einen ausgezeichneten Überblick über die Phänomene der Interferenz von Wellen im allgemeinen und von Materiewellen im besonderen. Der zunächst völlig fremde Gedanke, daß eine Welle überall dort wo sie nicht ist, sich selbst weginterferiert hat, wird als zentraler Punkt der Wellentheorie ausführlich und leicht eingängig dargestellt.
-  **Rhodes**, Richard; **The Making of the Atomic Bomb**; Simon and Schuster, New York, 1988
 -  Es wird schwer sein, ein besseres, wissenschaftlich anspruchsvolles und trotzdem sehr gut lesbares Buch über die Entstehung der Atombombe und gleichzeitig über die Geschichte der Quantentheorie und Kernphysik zu finden.
 -  Alle wesentlichen Akteure sind liebevoll porträtiert; ihre Entdeckungen, ihr Ringen um die Wahrheit, ihre Verflechtungen miteinander sowie ihre Auseinandersetzungen mit Nazi-Deutschland sind in eine überaus spannende Geschichte verwoben, die sowohl die Geburt der modernen Physik (und damit auch der Materialwissenschaft) als auch ihren Sündenfall in Hiroshima und Nagasaki als ein packendes menschliches Drama mit noch ungewissem Ausgang darstellt.

 **Weinberg**, Steven (1933 - ..); Nobelpreis **1979**; **Dreams of a Final Theory**, Vintage Books/Random House, 1994

- Ein sehr klar und gut lesbar geschriebenes Buch über die Suche nach der "finalen" Theorie" (der **TOE**; "*Theory Of Everything*"), dem heiligen Gral der Physik.
- Da der Weg zur TOE über die Quantentheorie führt, nimmt sie in Weinbergs Buch breiten Raum ein (ohne eine einzige Formel!). Gleichzeitig macht auch Weinberg klar, was "Wissenschaft" von "Pseudowissenschaften" unterscheidet und singt das hohe Lied des "Reduktionismus" - dem Bestreben, das Ganze über seine Einzelteile zu verstehen.
- Zielrichtung des Buches waren die Politiker (deswegen der völlige Verzicht auf ein bißchen Mathematik und Physik; es sind halt auch in Amerika überwiegend halbgebildete Juristen), denen er versucht klar zu machen, warum es sich lohnt, in den geplanten "**SSC**" (=Superconducting Super Collider), den ultimativen Teilchenbeschleuniger, ungefähr **8 Milliarden \$** zu investieren.
- Das ist viel Geld, man bekommt dafür schon fast einen Flugzeugträger oder kann die deutsche Steinkohle ein ganzes Jahr subventionieren!
- Der Bau des **SSC** wurde zwar begonnen, dann aber auf grund einer politischen Entscheidung abgebrochen.

 **Kaku**, Michio (1947-), **Hyperspace**, Anchor Books, Doubleday

- Wer mal in erzählerischer Form - keine Formeln - erfahren will, daß die alte Weisheit "*Fact is stranger than fiction*" auch im Zeitalter der **Science Fiction** noch gilt, sollte dieses Buch lesen.
- Der recht berühmte Physiker Kaku führt dabei in die höherdimensionalen Räume ein - von der vierdimensionalen Einsteinschen Raumzeit bis zur **26** (in Worten sechs-und-zwanzig)-dimensionalen Welt der Elementarteilchenphysiker und Kosmologen. Auch wenn sich das "in der Praxis" auf "nur" **10 Dimensionen** reduziert, hat wohl noch kein Science Fiction Schreiber so viele Dimensionen bemüht.
- Zeitreisen und "Sprünge" durch den Hyperraum sind so selbstverständlich wie Paralleluniversen - nur eben nicht als Science Fiction, sondern als mögliche Konsequenzen der "*String-Theorie*" dem derzeitigen Favorit für die **TOE**, die "Theory Of Everything"
- Nebenbei lernt man wiederum relativ schmerzlos einiges über die Quantentheorie.

 **Gell-Mann**, Murray (1929-), Nobelpreis **1969**, **The Quark and the Jaguar**, W.H. Freeman and Co.

- Das Buch des wohl bekanntesten lebenden Physikers - er war es, der das Wort "**Quark**" für die Konstituenten von Proton, Neutron usw. prägte. Er hat es, am Rande bemerkt, aus **James Joyce** "**Finnegans Wake**" übernommen; auch diese Geschichte steht im Buch. (Im Gegensatz zu denen, die sich gerne selbst als "Intellektuelle" bezeichnen, sich im wesentlichen aber nur mit ihresgleichen beschäftigen, haben Naturwissenschaftler in der Regel einen breiten Bildungshorizont. Siehe dazu auch in Feynmans Buch "[Surely You're Joking, Mr. Feynman](#)" im Kapitel **5** die Geschichte "*Bringing Culture to the Physicists*").
- Das Thema des Buches ist die Komplexität - wie kann man verstehen, daß das Ganze oft sehr viel mehr ist als die Summe seiner Teile? Auch Gell-Mann kommt nicht umhin, der Quantentheorie viele Seiten zu widmen.

 **Horgan**, John; **The End of Science**

- Ein schwer verfoemtes, da ketzerisches Buch! Der Autor - ein Wissenschaftsredakteur beim "Scientific American" - behauptet nicht mehr und nicht weniger, als daß es eine endliche Zahl von grundlegenden, dem Menschen zugänglichen Naturgesetzen gäbe, und daß wir praktisch alle schon gefunden haben. Die Quantentheorie ist prominent vertreten, insbesondere in ihrer Extremform, der Theorie der Elementarteilchen.
- Dazu kann man stehen wie man will; was das Buch aber sehr lesenswert macht, sind die detaillierten und unterhaltsamen Aufzeichnungen seiner Gespräche mit den großen Wissenschaftlern (inkl. der Philosophen) unserer Zeit. Dabei beleuchtet Horgan auch die diversen Strömungen der Wissenschaftstheorie; schon dafür lohnt es sich, mal hineinzuschauen.

 **Tipler**, Frank J. (1947 -); **Die Physik der Unsterblichkeit**, dtv **1994**

- Wer mal mit eigenen Augen sehen will, daß auch Professoren der theoretischen Physik gelegentlich völlig ausflippen (falls jemand da Zweifel haben sollte), kann sich dieses Buch zu Gemüte führen.
- Darin behauptet ein durchaus seriöser Physiker (mit vielen Formeln im Anhang), daß die **Theologie** letztlich ein Zweig der Physik sei, und dies aus der Quantentheorie (mit ein bißchen Relativitätstheorie) zwingend folgt. Damit ist auch das Weiterleben nach dem Tod "bewiesen". Muß man nicht ganz ernst nehmen.

Und so weiter, und so fort.

- Jede Flughafenbuchhandlung im angelsächsischen/USA Bereich hat meterweise populärwissenschaftliche Bücher zur Quantentheorie und zur Naturwissenschaft ganz allgemein - ein Trend, der an Deutschland seit Jahren spurlos vorbeigeht.
- Was man daraus wohl schließen kann?

Schrödingergleichung und Wasserstoffatom

Advanced

Im folgenden wird in **Kurzform** der Weg zur Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom skizziert. Dies ist, es sei nochmal darauf hingewiesen, ein **rein mathematisches** Problem.

Einige Vertrautheit mit partiellen Differentialgleichungen wird vorausgesetzt.

Die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} \right) + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) \cdot \psi(x,y,z) = 0$$

mit $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$

Da es sich um ein radialsymmetrisches Problem handelt, macht man (als Mathematiker) jetzt automatisch eine Transformation von **cartesischen** (x,y,z) Koordinaten zu **Kugelkoordinaten** (r, δ, φ) . Dies ist recht aufwendig, aber altbekannt. Um Verwechslungen des Winkels δ mit dem hier benutzten Zeichen für die partielle Differentiation auszuschließen, benutzen wir jetzt das "d" als Symbol auch für partielle Ableitungen. Wir erhalten:

$$\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\psi}{dr} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{2}{\sin \delta} \cdot \frac{d}{d\delta} \left(\sin \delta \cdot \frac{d\psi}{d\delta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \delta} \cdot \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} \right) + \frac{8m_e \pi^2}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Sieht nicht gerade einfach aus. Aber nicht verzweifeln, der Mathematiker kennt so was und weiß, daß der nächste Schritt ein **Separationsansatz** ist: Wir probieren mal, ob eine Darstellung der gesuchten Lösung als **Produkt aus drei Einzelfunktionen**, die jede nur von **einer** der Variablen abhängt, weiterführt. Wir schreiben also versuchsweise

$$\psi(r, \delta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\delta) \cdot \Phi(\varphi)$$

Nach scharfem Nachdenken folgt ziemlich schnell als erstes Ergebnis

$$\Phi(\varphi) = \exp \pm (i \cdot m \cdot \varphi)$$

für jedes ganzzahlige m

Damit läßt sich die S.-Gleichung verkürzen auf die noch zu bestimmenden Funktionen $R(r) \cdot \Theta(\delta)$, wir erhalten

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dR}{dr} + \frac{8m_e \pi^2}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right) \cdot R = - \frac{1}{\Theta} \cdot \left(\frac{1}{\sin \delta} \cdot \frac{d}{d\delta} \left(\sin \delta \frac{d\Theta}{d\delta} \right) - \frac{m^2 \Theta}{\sin^2 \delta} \right)$$

Die Gleichheit zweier beliebiger Funktionen die von verschiedenen Variablen abhängen, wie sie die obige Gleichung verlangt, kann **nur** gegeben sein, wenn der linke und der rechte Term für beliebige Werte von r oder δ immer eine Konstante, wir nennen sie mal α , ergibt.

Damit haben wir jetzt **zwei** Differentialgleichungen, eine für R und eine für Θ . Schauen wir zunächst die für Θ näher an. Wir haben (gleich etwas umgeschrieben)

$$\frac{1}{\sin \delta} \cdot \frac{d}{d\delta} \left(\sin \delta \frac{d\Theta}{d\delta} \right) + \left(\alpha - \frac{m^2}{\sin^2 \delta} \right) \Theta = 0$$

Der Mathematiker freut sich, denn diese Gleichung kennt er: Es ist die Definitionsgleichung für die **Kugelflächenfunktionen**, altbekannt (wenn auch nicht leicht zu lösen) von vielen klassischen Problemen.

Zunächst zeigt sich, daß diese Gleichung **nur** Lösungen hat falls

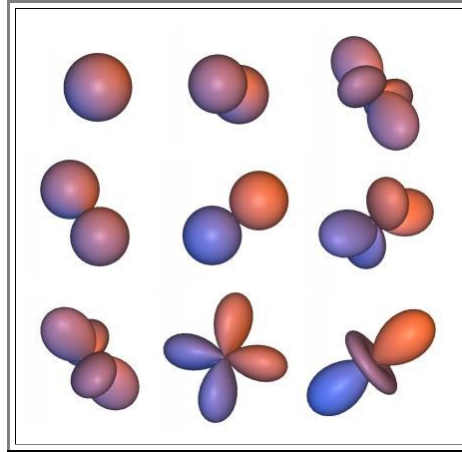
$$\alpha = (\mathbf{k} + \mathbf{m}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{m} + \mathbf{l})$$

gilt, wobei **k** und **m** eine positive ganze Zahl sein muß. Wir benutzen hier gleich das Symbol "**m**", weil es sich herausstellen **wird**, daß es identisch sein muß zu dem bereits eingeführten **m**.

Für **k + m** benutzen wir ein neues Symbol, nämlich **l**, und nennen die zu $\alpha = \mathbf{l} \cdot (\mathbf{l} + \mathbf{1})$ gehörende Lösung "**Kugelwellenfunktion l-ter Ordnung**".

Davon gibt es **l + 1** verschiedene, da **m** den Wertebereich von **0** bis **l** durchlaufen kann (genau hinschauen).

Man kann jetzt die Mannigfaltigkeit der Lösungen durchgehen. Sie sind alle bekannt und jeder hat sie schon gesehen:



Dabei ist der Wert für **l** entscheidend für die Komplexität: Für **l = 1** gibt es eine Kugel; für **l = 2** die Kugeldoppelkeule, etc. Der Wert für **m** gibt die verschiedenen Orientierungen im Raum oder sonstige Varianten wieder.

Wenden wir uns der Differentialgleichung für **R** zu. Statt mit α können wir die Gleichung jetzt mit $\mathbf{l} \cdot (\mathbf{l} + \mathbf{1})$ formulieren und erhalten

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(\frac{8m_e \pi^2 \cdot E}{h^2} + \frac{8m_e \pi^2 e^2}{4h^2 \pi \epsilon_0 r} - \frac{\mathbf{l} \cdot (\mathbf{l} + \mathbf{1})}{r^2} \right) \cdot R = 0$$

Jetzt wird es trickreich. Auch der Mathematiker braucht uns wieder: Von allem **möglichen** Lösungen, die diese Differentialgleichung noch zuläßt, müssen einige auf Grund physikalischer Kriterien ausgeschieden werden, d. h. wir müssen **Randbedingungen** definieren, z.B. daß $\psi(r \rightarrow \infty) = 0$ sein muß - sehr weit weg vom Atomkern wollen wir keine Elektronen mehr finden!

Nach längerer Rechnung findet man zwei wichtige allgemeine Aussagen

1. Alle Lösungen kann man wie folgt darstellen:

$$R = v(r) \cdot \exp - \left(r \cdot \left(\frac{-8m_e \pi^2 \cdot E}{h^2} \right)^{1/2} \right)$$

with **v(r)** being some function that must now be determined from a somewhat simpler differential equation resulting after plucking this formula into the differential equation for **R(r)**.

Note that the argument of the exponential in the equation for **R** contains the **root** of something **negative**: $(-8m_e \pi^2 \cdot E/h^2)^{1/2}$ - this is the point where the solutions of the S.- equations become **complex**!



(Entschuldigung; ist so reingerutscht - aber Englisch muß für einen Materialwissenschaftler selbstverständlich sein).

2. Lösungen existieren **nur** falls immer gilt

$$\left(\frac{8m_e \pi^2 \cdot e^2}{4\pi \epsilon_0 h^2} \right)^2 = n^2 \cdot \frac{8m_e \pi^2 \cdot E}{h^2}$$

wobei **n = 1,2,3,4...** sein muß.

Damit haben wir eine Formel für die **Energie** gefunden, die uns **bekannt vorkommt** :

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \frac{m_e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

Wenn man die Lösungen jetzt schließlich ausrechnet (mit erheblicher Mühe), findet man, daß der Radialteil der Wellenfunktion, also $R(r)$, von $r = 0$ ausgehend immer schnell auf 0 abklingt, wobei er je nach n , noch ein paar Male ($n - 1$ mal, um genau zu sein) zwischen positiven und negativen Werten hin und her oszilliert - [so haben wir das auch schon gemalt](#).

Nun setzen wir alles zusammen, bilden also das Produkt

$$\psi(r, \delta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\delta) \cdot \Phi(\varphi)$$

Damit bekommen wir:

1. genau die **Orbitale**, die wir als Lösungen einfach postuliert haben,
2. Die diversen Beziehungen zwischen den drei **Quantenzahlen** n , l , m , die aus der Lösung "herausgefallen" sind,
3. Eine simple Gleichung für die Gesamtenergie E , die beim Wasserstoffatom nur von der **Hauptquantenzahl** n abhängt, und
4. ein Gefühl dafür, was auf uns zukäme, wenn wir jetzt zum **He** Atom schreiten würden, oder noch ein Magnetfeld einschalten, oder sonst noch ein bißchen zusätzliche Komplexität einführen.

Wow!!! Es könnte jetzt der Eindruck entstanden sein , das sei **schwierig**.

- Ist es aber nicht - es ist nur **kompliziert**. Wir haben halt keine einfache Methode, relativ einfache dreidimensionale Körper durch mathematische Gleichungen darzustellen.
- Sind die oben gezeigten Kugelwellenfunktionen schwer **vorstellbar**?

Eben! Nur die Formeln drumrum sind länglich. Da wir weder Mathematiker noch Physiker sind, lassen wir uns von dem mathematischen Gerüst nicht schrecken - meistens reicht das Vorstellungsvermögen für das was die Gleichungen beschreiben für unsere Zwecke völlig aus.

Ludwig Boltzmann (1844 - 1906) und die Atome

Advanced

Ludwig Boltzmann war ein Wiener Physiker, der uns noch oft begegnen wird. Er hat letztlich die statistische Interpretation des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik, eines der grundlegendsten Gesetze der Physik (und der Informationstheorie) gefunden.

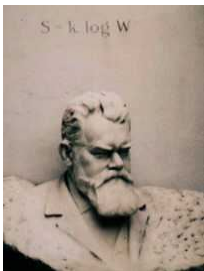
Die folgende Formel wird uns noch oft begegnen; sie steht auf seinem Grabstein:

$$S = k \ln W$$

S ist die **Entropie**, ein Zentralbegriff der Physik und Materialwissenschaft.

Boltzmann hat als erster eine Theorie der Wärme formuliert, die auf der statistischen Betrachtung der Bewegung von Atomen beruht; der **statistischen Thermodynamik**.

Naturgemäß mußte er dazu Atome als real existierende kleinste Bausteine der Materie annehmen. Die Probleme, die er damit hatte, und die ihn in den Selbstmord trieben, schildert der nächste Absatz, der in loser Übersetzung aus dem Buch "[Paradigms lost](#)" von John L. **Casti** entnommen ist.



Boltzmanns Problem war, daß seine Theorie der Wärme ein Assemble von Atomen erforderte, das sich nach den Regeln der klassischen Mechanik bewegte. Er benutzte das Konzept eines Atoms als ein Materieteilchen, um in seiner Theorie "Wärme" als eine statistische Eigenschaft erklären zu können, die aus der Gesamtbewegung der Atome resultiert. Beachtenswert ist, daß diese Theorie um die Jahrhundertwende entstand, einige Jahre bevor die Arbeiten von Rutherford, Thomson und Bohr das moderne Konzept der Atome begründeten. Als Ergebnis seiner "atomaren Spekulationen" wurde Boltzmann in einen heißen Streit mit den damaligen Giganten der Wissenschaft verwickelt, insbesondere mit seinem Wiener Kollegen Ernst **Mach** und dem deutschen (physikalischen) Chemiker Wilhelm **Ostwald**, die kräftig gegen die Idee von Atomen argumentierten. Ostwald präferierte eine Theorie der Wärme die auf den Begriff der Energie beschränkt blieb und keine Materie brauchte.

Deprimiert durch die Angriffe seiner Gegner, aber auch durch seine nachlassende Sehfähigkeit und seinen - wie er das empfand - nachlassenden geistigen Fähigkeiten, nahm sich Boltzmann am 5. September **1906** das Leben.

Es wäre nun grundfalsch anzunehmen, daß Boltzmanns Gegner Dummköpfe waren, die das Offensichtliche nicht erkennen konnten. Sowohl Mach als auch Ostwald haben bleibende Beiträge zur Wissenschaft geleistet ("Machsche Zahl", "Ostwald-Reifung"). Auch heute noch berühmte Wissenschaftler wie Max **Planck**, Pierre **Duhem** oder Henri **Poincaré** gehörten zu den Gegnern der "Atome"! Was man aus dieser Episode lernen kann ist:

Auch in den Naturwissenschaften ist "**Wahrheit**" nicht immer sofort erkennbar; der individuelle Glaube an was "wahr" ist, hängt durchaus von Zeitströmungen und den vorherrschenden Paradigmen der Gesellschaft ab.

Daraus aber zu schließen, daß es **keine** naturwissenschaftlichen Wahrheiten gäbe, und **alle** Hypothesen und Theorien gleichberechtigt sind (was in letzter Konsequenz z.B. dazu führte, daß in vielen Staaten der USA die sog. "Creation", d.h. die Schöpfungsgeschichte der Bibel, gleichberechtigt neben der Evolutionstheorie gelehrt werden **muß!**) ist falsch! Denn **die Wahrheit** wird sich in den exakten Wissenschaften immer durchsetzen - es dauert nur gelegentlich ein Weilchen.

Dazu nun die **Meinung eines Lesers**:

Hier die aus meiner Sicht notwendige Ergänzung: Die Schöpfungsgeschichte der Bibel will gar keine naturwissenschaftliche Theorie sein. Daraus aber zu schließen, dass sie keine Wahrheit enthielte, hieße, dem Szientismus zu huldigen, der außer der naturwissenschaftlichen Erkenntnis keine Wahrheit anerkennt. Die Evolutionstheorie mag in vielen Teilbereichen ihre Meriten haben. Auf die ganze Wirklichkeit angewandt hört sie aber auf, eine naturwissenschaftliche Theorie zu sein, sondern bleibt eine geschichtsphilosophische Hypothese, die philosophische Vorentscheidungen enthält, die wiederum stark in Richtung Szientismus weisen. Die Behauptung mancher Leute, sie könnten naturwissenschaftlich erklären, wie solche Phänomene wie Leben oder reflexives Bewußtsein entstanden seien, enthält ja bereits die Annahme, daß Leben oder reflexives Bewußtsein naturwissenschaftlich vollständig definierbar sind. Dies ist aber ein logischer Zirkel.

So, wie in ihrem Skript angedeutet, glaube ich auch, dass es naturwissenschaftliche Wahrheiten gibt. Aber ich glaube, dass es auch andere Wahrheiten gibt. Man darf die verschiedenen Ebenen nicht vermengen.

Und dazu nun meine Aussage:

- Obige Sätze sollten nicht ausschließen, daß die Bibel (und damit auch die Tora), der Koran, das Buch Mormon, oder jedes der vielen anderen heiligen Bücher Wahrheiten enthalten.
- Was sich aber schon bezweifeln lässt, ist der Anspruch auf alleinige, wörtliche und ausschließliche Wahrheit. Der Schwerpunkt im obigen Satz liegt auf deshalb "*alle*".

Richard Feynman (1918 - 1988) und die Atome

Advanced

Richard Feynman war eine der bedeutendsten Physiker der Mitte des 20. Jahrhunderts und außerdem eine Art Unikum und Universalgenie.

- Mehr zum Zeitvertreib entschlüsselte er Maja Zahlensysteme, begann zu zeichnen und malen (auch schon mal im Auftrag ein Gemälde für ein Bordell), trieb sich in den Spielhöhlen von Las Vegas rum, machte Musik mit der Bongo Trommel (durchaus professionell), knackte Tresore in Los Alamos beim Bau der Atombombe, schrieb novellistische Bestseller und hatte alles in allem viel Spaß. Den Nobelpreis bekam er **1965**.

Außerdem war er ein passionierter Lehrer, der gerne Studierende um sich herum hatte. Ein Originalzitat aus "*Surely you're joking, Mr. Feynman!*" (s.u.) liest sich so:

I don't believe, I can really do without teaching. The reason is, I have to have something so that when I don't have any ideas and I'm not getting anywhere, I can say to myself, "At least I'm living, at least I'm *doing* something ; I'm making *some* contribution" - it's just psychological.

When I was in Princeton in the 1940s I could see what happened to those great minds at the Institute for Advanced Study, who had been specially selected for their tremendous brains and were now given this opportunity to sit in this lovely house by the woods there, with no classes to teach, with no obligations whatsoever. These poor bastards (zu denen **Einstein** gehörte!) could now sit and and think clearly all by themselves, OK? So they don't get any ideas for a while: They have every opportunity to do something, and they're not getting any ideas. I believe that in a situation like this a kind of depression worms inside you, and you begin to *worry* about not getting any ideas. And nothing happens. Still no ideas come.

Nothing happens, because there's not enough *real* activity and challenge: You're not in contact with the experimental guys. You don't have to think how to answer questions from students. Nothing!

In any thinking process there are moments when everything is going good and you've got wonderful ideas. Teaching is an interruption, and so it's the greatest pain in the neck in the world. And then there are the *longer* periods of time, when not much is coming to you. You're not getting any ideas, and if you're doing nothing at all, it drives you nuts! You can't even say "I'm teaching my class."

Anfang der 60er Jahre las Feynman die Einführungsvorlesung für Physik im "Caltech" (Californian Institute of Technology), eine der berühmtesten amerikanischen Universitäten). Aus dem "Skript" wurden die "[Feynman Lectures on Physics](#)", die vielleicht berühmtesten Lehrbücher in der Physik.

Sein bekanntestes Buch, eine Art Autobiographie mit einzelnen, fast immer ziemlich komischen Episoden (die Beschreibung seiner Musterung nimmt es ohne weiteres mit der bekannten Szene aus **Thomas Manns** "*Felix Krull*" auf), war ein Bestseller. Es heißt

- Surely you're joking, Mr. Feynman!*
(Bantam Books, **1985**)

- Eine Art Fortsetzung heißt:
What do you care, what other people think










In diesem Buch ist Feynmans Erfahrung mit Regierungskommission dargestellt, die er als Mitglied der Präsidialkommission bei der Untersuchung des Challenger Unglücks in reichem Maße machen konnte.

- Sehr empfehlenswert ist auch noch
QED - The Strange Theory of Light and Matter
(Princeton Science Library)

Das Büchlein ist die gedruckte Version von vier Vorträgen über Quantenelektrodynamik, die Feynman für Laien konzipierte. Es ist sehr leicht zu lesen und gibt einen ausgezeichneten Überblick über die Phänomene der Interferenz von Wellen im allgemeinen und von Materiewellen im besonderen.

Roger Penrose (1931 -)

Advanced

-  Roger Penrose hat zu vielen Gebieten der Forschung herausragende Beiträge geleistet, insbesondere in der Astrophysik und Kosmologie, aber auch zur Thematik [Quasikristalle](#).
-  Wie viele Naturwissenschaftler, hat ihn im Alter eine berufstypische Krankheit erfaßt: Er widmet sich den "**letzten Fragen**" und beginnt - im weitesten Sinne - zu philosophieren. Sein Hauptthema ist die Entstehung des Bewußtseins auf der Basis der Atome; d.h. ohne irgendwelche (religiöse oder sonstige) Zutaten. Er hat dazu zwei Bücher geschrieben:
 -  Des Kaisers neue Kleider (Originaltitel: *The Emperor's New Mind*)
 -  *Shadows of the Mind* - die Fortsetzung. (Gibt's wohl auch auf Deutsch).
-  In diesen Büchern widmet er sich der schlichten Frage "**Was ist Bewußtsein**", oder "**Wird es jemals künstliche Intelligenz auf der Basis algorithmischer Rechner geben?**" (Seine Antwort ist: **Nein!!!**).
 -  Mit seiner zentralen These, daß es für Bewußtsein **mehr** bedarf als eines großen Rechners (das Kleinhirn, z.B., obwohl ein fast so großer Haufen komplex verschalteter Neuronen wie das Großhirn, hat **kein** Bewußtsein (soweit wir das zu wissen glauben)), und daß dieses "**Mehr**" irgendwo in der Quantenunbestimmtheit zu suchen ist, stößt er allerdings weithin auf Skepsis.
 -  Sei dies wie es sei, die Bücher enthalten doch - in halbwegs lesbarer Form bis zu echt spannend geschriebenen Kapiteln - einen Rundumschlag über so gut wie alles, was heute an spannender Wissenschaft und Wissenschaftphilosophie so läuft - auf verständlichem [und](#) trotzdem hohem Niveau
-  Zum Beispiel: komplexe Zahlen, Turing Maschinen, Komplexitätstheorie, Paradoxia der Quantentheorie, formale System, Gödelsche Unentscheidbarkeitstheoreme, Quasikristalle (die ganz schnell zu [modernsten mathematischen Problemen](#) führen), Hilberträume, schwarze Löcher, weiße Löcher, Hawking-Strahlung, Entropie, die Struktur des Universums, die Struktur des Gehirns, Zeitreisen (tatsächlich im Prinzip möglich), Fraktale, Chaos, - und so weiter und so fort.
 -  Wer auch nur ansatzweise an diesen Themen interessiert ist, kommt an diesen Büchern nicht vorbei.

Stolpersteine der Physik am Ende des 19. Jahrhunderts

Advanced

Man ist leicht geneigt, die "Erfindung" der Quanten- und Relativitätstheorie auf **einen** spezifischen Anlaß zurückzuführen, oder dem Genius **eines** Mannes zuzuschreiben.

- Das ist aber viel zu kurz gedacht. Denn Ende des **19.** Jahrhunderts gab es eine ganze Reihe von Erscheinungen, die mit der bekannten Physik schlicht **nicht** vereinbar waren: Ein kurze unsystematische Liste enthält zum Beispiel:

Die spezifische Wärme von Gasen.

- Eine unwiderlegbares Ergebnis der statistischen Wärmetheorie (um **1900**) war, daß die spezifische Wärme **c** proportional sein mußte zur Zahl der möglichen Freiheitsgrade des Moleküls, Energie zu "speichern". Ein **einziges Atom** hat nur **3** Freiheitsgrade: Die Bewegung in den drei Raumrichtungen und damit drei Freiheitsgrade für die kinetische Energie $\frac{1}{2} m \cdot v_i^2$, $i = x, y, z$.
- Ein **zweiatomiges** Molekül hat außer den **3** Freiheitsgraden der Bewegung des Schwerpunkts noch **3** Freiheitsgrade der Rotation um diverse Achsen, und Freiheitsgrade in den Schwingungen der Atome relativ zueinander; bei dreiatomigen Molekülen wird es langsam unübersichtlich - es gibt zahlreiche Freiheitsgrade.

Gasmoleküle aller Arten dachten aber gar nicht dran, der Vorhersage zu folgen - es war ein unlösbares Problem ohne die Quantenmechanik.

Die **Strahlung eines schwarzen Körpers**, d.h. einer speziellen Lampe. (Bei nicht zu niedrigen Temperaturen wird aus **jedem** Material in jeder **Form** diese "spezielle" Lampe; **alles** leuchtet mit (fast) identischem Spektrum bei hoher Temperatur).

- Das gemessene Spektrum war grundverschieden von dem Vorhergesagten. Hier hat Max **Planck** den Durchbruch geschafft, und die Quantenmechanik "erfunden".
- Das hat er aber nicht durch scharfes Nachdenken und Postulieren einer neuen Physik gemacht, sondern durch mathematisches Herumspielen mit den Formeln unter der Überschrift: "Was wäre, wenn man hier mal was anderes einsetzt".
- Erst als er dann eine Formel erhielt, die exakt zu den Experimenten paßte, setzte das Nachdenken darüber ein, was der mathematische Ansatz eigentlich bedeutet.

Der photoelektrische Effekt.

- Aus Metallen (und allen anderen Materialien auch), kann man durch Beleuchten, d.h. Energiezufuhr, Elektronen herausschlagen. Klassisch sollte es nur darauf ankommen, **genügend** Energie zuzuführen, d.h. nur auf die **Intensität** des eingestrahlt Lichts.
- Das Experiment sagte aber eindeutig: Entscheidend ist die **Wellenlänge**, nicht die Intensität. Erst Albert **Einstein** fand die Erklärung (auf dem Hintergrund der sich gerade bildenden Quantenmechanik).
- Dafür bekam er übrigens seinen **einen** Nobelpreis - er hätte noch mindestens **vier** weitere bekommen müssen: für die **spezielle Relativitätstheorie**, die **allgemeine Relativitätstheorie**, die **atomistische Erklärung der Diffusion** und für die Vorhersage der sogenannten **Bose-Einstein Kondensation**, die **1997** erstmals experimentell nachgewiesen wurde (Nobelpreis dafür **2001**). Außerdem vielleicht noch eine **sechsen** für die Vorhersage der **stimulierten Emission**, der Grundlage des Lasers.

Und dann waren da noch die **Spektren** der Atome, Moleküle usw., deren Spektrallinien klar erkennbare Gesetzmäßigkeiten folgten, die aber von keiner Theorie erklärt werden konnten.

- Hier hat Niels **Bohr** mit seinem simplen Modell für die absolute Sensation gesorgt

Nicht vergessen wollen wir:

- Den **Compton Effekt** - er ist in einem eigenen Modul behandelt.
- Die allgemeine Erscheinung der **Radioaktivität**, die im Rahmen der klassischen Physik nicht vorgesehen ist.
- Den experimentellen Nachweis der absoluten **Konstanz der Lichtgeschwindigkeit** (oder den Nachweis der Nichtexistenz des "Äthers") durch **Michelson** und **Morley** - einer der Gründe für die Notwendigkeit der **speziellen Relativitätstheorie**.
- Die Antwort auf die Frage: **Was hält die Sonne am Laufen?** - d.h. woher kommt die "unerschöpfliche" Energie mit der sie uns mit Licht und Wärme versorgt?
- Die Frage, aus was Atome eigentlich bestehen - nachdem **Rutherford** gezeigt hat, daß man beim gezielten Nachschauen im wesentlichen leeren Raum findet.

- Die Frage, was die mechanischen Eigenschaften der Metalle bestimmt (Was genau passiert beim Schmieden?).

Man könnte weitermachen Aber klar wird doch: Die neuen Theorien lagen in der Luft, zuviel stimmte nicht mehr.

Jetzt fragen wir uns mal: Wie sieht die Liste **heute** aus? Welche grundsätzlichen Fragen sind mit der heutigen Physik nicht zu beantworten?

- Leicht gefragt - schwer zu beantworten (die Physiker im ausgehenden **19.** Jahrhundert hätten die obige Liste auch nicht so leicht zusammen bekommen).
- So etwas richtig auffälliges, was auch "der kleine Mann auf der Straße" oder sogar ein Journalist sofort versteht, gibt es nicht.

Aber mindestens **zwei** ganz große Rätsel existieren doch und werden immer drückender:

1. Die **Quantentheorie und die allgemeine Relativitätstheorie**, die jede für sich in ihrem Bereich mit absolut phantastischer Genauigkeit stimmt (bis auf **10** Stellen hinter dem Komma soweit meßbar), passen **nicht zusammen**.

- Ein Beispiel: Die sog. **kosmologische Konstante** in der **allg. Relativitätstheorie** ist gemessen, sie ist nicht weit weg von Null. Rechnet man sie aber mit der **Quantentheorie** aus, ergibt sich ein Wert von **10^{40} - 10^{120}** - die schlechteste Vorhersage die jemals gemacht wurde.
- Leider spielt die kosmologische Konstante in "kleinen" Dimensionen (d.h. Dimensionen kleiner als ca. Galaxien) überhaupt keine Rolle, d.h. man kann keine einfachen Experimente dazu machen. Und in kosmologischen Dimensionen kann man nicht so leicht experimentieren. **Wir werden sehen**.

1a Ein ähnlich gelagertes Problem: Im Universum ist der Teufels los - oder präziser gesagt, die "Kosmologie" als Wissenschaft produziert zunehmend tiefe und unbeantwortete Fragen.

- Nachdem die **"Big Bang"** Theorie im Prinzip experimentell unwiderlegbar bestätigt wurde, gab es dann schnell Probleme mit den "Details"
- **1980** war dann das nicht leicht eingängige Modell des "inflationären Universums" (inflationary universe) ein großer Fortschritt; **1992** wurde es durch Präzisionsmessungen der **Hintergrundstrahlung** experimentell "bestätigt".
- Aber immer wieder tauchen neue Probleme auf: Die sichtbaren Auswirkungen der Gravitation sind z.B. nicht im Einklang mit der **sichtbaren** Materie: Galaxien Sterne, kosmischer Staub, etc.. alles was man her auf Erden sehen oder anderweitig nachweisen kann, sind nur ein paar Prozent dessen, was im Universum Gravitation erzeugt.
- Zunächst schien es auszureichen, die Existenz einer **"dunklen Materie" ("dark matter")** zu postulieren, die dann aber irgendwelche, noch nicht gefundene, und auch nicht so richtig vorhergesagte, neuartige Elementarteilchen bedingt.
- Heute (nach **2000**) wird aber zunehmend klar, dass die postulierte dunkle Materie auch nur **25 % - 30 %** der beobachteten Gravitation verursachen kann; postuliert wird jetzt zusätzlich noch eine ziemlich obskure **"dunkle Energie" ("dark energy")**, die die restlichen ca. **70%** Gravitation trägt.
- Ein bißchen haftet der dunklen Materie und Energie der Geruch des **Äthers** seelig an, des im **19.** Jahrhundert postulierten und tief und fest geglaubten "ätherischen" und unfäßbaren Hintergrundmaterials, in dem sich all das abspielen sollte was wir heute mit "elektromagnetischem Feld" usw. bezeichnen.
- Die kosmologische Inflation und die dunkle Materie und Energie sind sehr eng mit Elementarteilchen und Quantentheorie verwoben, deshalb ist erst mit der Lösung der ersten Frage auch ein Durchbruch bei der Kosmologie zu erwarten.

Ob es die "kosmologische Inflation" sowie die "dunkle Materie und Energie", und was immer noch kommen wird, aber wirklich gibt, oder ob sie irgendwann einmal als "Äther **2.** Art" in den Orkus geworfen werden, weiß heute niemand. Klar ist nur, dass es an dieser Stelle zunehmend "klemmt".

2. Die zweite Frage ist nach der Existenz von **künstlicher Intelligenz** und damit gekoppelt, dem Wesen des (menschlichen?) **Bewußtseins**.

- In anderen Worten: Könnte ein **technisches** informationsverarbeitendes Gebilde mit der Komplexität des menschlichen Gehirns (ein Computer) soviel Intelligenz haben wie ein Mensch - oder zumindest ein Menschenaffe - ohne daß man grundsätzlich neue Erkenntnisse zu seiner Konstruktion braucht?
- Hat ein ausreichend komplexer Computer (immer inklusive Software) automatisch eine Art Bewußtsein? Oder braucht es dazu bestimmte, im Moment gar nicht bekannte Hard- und/oder Software?
- Falls ja, kann der Mensch diese notwendigen Zutaten jemals finden? Oder ist es ihm prinzipiell unmöglich? Sind diese Zutaten vielleicht mit Begriffen wie "Seele", "Schöpfung", "Gott" beschreibbar?
- **Wir werden sehen** - zumindest einen Teil. Denn Computer, deren Komplexität vergleichbar sein wird mit der des menschlichen Gehirns, sind durchaus in den nächsten **50** Jahren zu erwarten.

Hier eine Buchbesprechung zum Thema (mit Literaturhinweisen für Interessierte):

PETER RICHTER, MARTIN REES: Das Rätsel unseres Universums. Hatte Gott eine Wahl? C. H. Beck Verlag, München 2003. 219 Seiten, 19,90 Euro.

Dunkel das Leben, die Materie und Energie. Gott kam nur bis zum Ereignishorizont: Der königlich-britische Hofastronom Martin Rees erklärt die Rätsel der Kosmologie Vor zwölf Jahren sollte die sogenannte „dunkle Materie“ „das Rätsel unseres Universums“ lösen

(John Gribbin und Martin Rees: Ein Universum nach Maß. Bedingungen unserer Existenz. Birkhäuser 1991).

Inzwischen haben neue Beobachtungen der Astronomen neue Rätsel aufgegeben, und nun muss zusätzlich auch eine „dunkle Energie“ für den Großteil unseres Nicht-Verstehens herhalten. Nur vier Prozent dessen, was die Welt auszumachen scheint, lässt sich als bisher bekannte Materie oder Energie identifizieren: als Sterne, kosmischer Staub oder Strahlung. 25 bis 30 Prozent werden als unbekannte „dunkle Materie“ in Ansatz gebracht, um das Standard-Modell der Kosmologie mit den Daten in Einklang zu bringen. Der Rest, an die 70 Prozent, geht auf das Konto der „dunklen Energie“, die anders als Materie nicht zur Gravitation beiträgt, sondern im Gegenteil die Expansion des Kosmos immer noch beschleunigt.

Bis 2010 – so hofft **Martin Rees**, Professor der Astronomie und Kosmologie sowie Master des Trinity College in Cambridge, seit 1995 auch königlich-britischer Hofastronom – dürfte die Natur von dunkler Materie und dunkler Energie erkannt sein. Derzeit aber blühen vor allem Spekulationen; sein kürzlich ins Deutsche übersetztes Buch „Das Rätsel unseres Universums. Hatte Gott eine Wahl?“ lädt uns ein, daran teil zu haben. Der englische Originaltitel „Our Cosmic Habitat“ gibt allerdings besser wieder, wovon das Buch hauptsächlich handelt: von dem, was zu Beginn des 21. Jahrhunderts mit einiger Sicherheit über unseren kosmischen Lebensraum gesagt werden kann – ein kompetent und flüssig geschriebenes Update zum Stand der Kosmologie. Wer frühere Bücher von Rees oder auch anderen Autoren gelesen hat, wird viel Vertrautes finden.

Etliches ist aber erst kürzlich hinzu gekommen: die Entdeckung extrasolarer Planeten-Systeme, die präzise Vermessung der kosmischen Hintergrund-Strahlung, die Analyse einer großen Zahl von Gravitationslinsen, schließlich der unerwartete Befund einer beschleunigten Expansion des Kosmos. Die Gewissheit über Planetensysteme von anderen Sternen gibt der Diskussion über extraterrestrisches Leben neue Nahrung. Die genaue Kenntnis der Fluktuationen des Strahlungs-Hintergrunds erlaubt erstmals, die Entstehung von Galaxien auf der Basis empirischer Daten überzeugend zu modellieren – auf diesem Gebiet war Rees selbst forschend tätig. Daran knüpft sich die Feststellung, dass in einer frühen Phase der kosmischen Evolution bestimmte Bedingungen recht genau eingehalten sein mussten, wenn es denn einerseits überhaupt zu lokaler Kondensation, andererseits aber nicht zu raschem Kollaps der Galaxien in schwarzen Löchern kommen sollte. Ist dies schon Ausdruck einer auf Leben abzielenden – „biophilen“ – Disposition des Universums?

Die aufregendsten Fragen stellen sich im Zusammenhang mit der Beobachtung des jungen Kosmos. Aus zehn Milliarden Lichtjahren Entfernung kommt Licht, das „nur“ drei Milliarden Jahre nach dem Urknall ausgesandt wurde. Wo es an Galaxien vorbei streicht, wirken diese als Gravitationslinsen, wobei die Stärke des Effekts den Schluss auf dunkle Materie unausweichlich zu machen scheint. Sofern das Licht von Supernovae stammt, erlaubt es eine Bestimmung der kosmischen Expansion vor zehn Milliarden Jahren. Und da zeigt sich, dass diese langsamer war als heute. Was aber mag sie beschleunigen? Dunkle Energie! Eins, zwei, viele Universen?

Die allgemeine Relativitätstheorie lässt tatsächlich eine gleichmäßig im Raum verteilte abstoßende Kraft zu. Einstein selbst hatte sie als „kosmische Konstante „Lambda““ eingeführt, um ein statisches Universum zu modellieren, welches unter dem Einfluss der allgegenwärtigen Gravitation nicht kollabieren würde. Er nannte das eine Eselei, als sich bald darauf herausstellte, dass der Kosmos nicht statisch ist und seine Theorie auch ohne Lambda mit den damaligen Beobachtungen kompatibel war. Zudem hatte er – und haben wir bis heute – keine physikalische Interpretation der durch Lambda beschriebenen Kraft. Nun aber soll sie die „dunkle Energie“ repräsentieren.

Rees ist ehrlich genug, das Ausmaß der Krise einzugestehen, in der sich die Kosmologie damit befindet: „die naheliegendste theoretische Vorhersage für Lambda“ führe „zu einer kosmischen Abstoßung, die um **120** Zehnerpotenzen größer ist als der tatsächlich vermutete Wert“. Noch nie dürften theoretisches Verstehen und empirischer Befund so weit auseinander gelegen haben. Rees interpretiert den aufgrund von Beobachtungen „tatsächlich vermuteten Wert“ als eine der „Feinabstimmungen“, „die für ein Universum mit organischem Leben, wie wir es hier auf der Erde vorfinden, notwendig sind“. Und er zieht zu deren Erklärung drei Möglichkeiten in Betracht: den Zufall, göttliche Fügung und ein Multiversum. Die ersten beiden werden nach kurzer Diskussion als unergiebig verworfen – im Übrigen kommt Gott, anders als der Titel suggeriert, in dem Buch nicht vor.

Rees favorisiert, wie schon 1991 in dem Buch mit Gribbin, die Idee eines aus vielen Universen bestehenden Multiversums, das während einer inflationären Phase der kosmischen Entwicklung kurz nach dem Big Bang entstanden sein mag: jedes einzelne Universum mit unterschiedlichen Werten von Lambda (und anderen Konstanten), ein Teil seiner Struktur allgemeinen Gesetzen gehorchend, ein anderer Teil dem Zufall überlassen, so wie alle Schneeflocken zwar notwendig sechsfache Symmetrie besitzen, im Einzelnen aber durch individuelles Schicksal geprägt sind. Vielleicht sollte man da, wo Erklärungen nicht überzeugen können, keine anbieten. Das Multiversum ist eine Metapher für Vielfalt der Möglichkeiten, sonst nichts. Wenn ein „Verständnis“ der Beobachtungen zu 96 Prozent exotische Versionen von Materie und Energie benötigt, sind Zweifel an der Gültigkeit des Standard-Modells – im Großen wie im Kleinen – angebracht. Für das Kleine, das Innere der schwarzen Löcher, besteht Konsens, dass erst die Verschmelzung von Gravitation und Quantenphysik gelingen muss, ehe mehr als nur Spekulatives darüber gesagt werden kann.

Im Großen scheinen dunkle Materie und dunkle Energie eine ähnliche Rolle zu spielen wie im 19. Jahrhundert der Äther. Der Relativitätstheorie täte es 100 Jahre nach ihrer Geburt (1905) keinen Abbruch, wenn eine neue Theorie

auch ihr die Grenzen aufzeigte.

Feynman und Pauli-Prinzip

Advanced

Wer Feynman aus seinen populärwissenschaftlichen Büchern kennt, weiß, daß er es als persönliche Niederlage empfunden haben muß, das Pauli-Prinzip nicht "erklären" zu können. In den "[Lectures](#)" (Band 3; Kapitel 4-3) schreibt er:

This brings up an interesting question: Why is it that particles with half-integral spin are Fermi particles (...) whereas particles with integral spin are Bose particles (...)?

We apologize for the fact that we can not give you an elementary explanation.

An explanation has been worked out by Pauli from complicated arguments from quantum field theory and relativity. He has shown that the two must necessarily go together, but we have not been able to find a way to reproduce his arguments on an elementary level. It appears to be one of the few places in physics where there is a rule which can be stated very simply, but for which no one has found a simple and easy explanation. (...)

This probably means that we do not have a complete understanding of the fundamental principle involved. For the moment, you will just have to take it as one of the rules of the world.

So be it!

Wer es aber trotzdem ein bißchen genauer wissen will, der möge den [Link](#) betätigen

Spin

Vorbemerkung

Advanced

Was ist der Spin eines **Elementarteilchens**?

- Einerseits ist der Spin eine abstrakte "elementare" Eigenschaft jenseits der ummittelbaren Wahrnehmung oder Vorstellung, andererseits aber hat er offensichtlich auch etwas mit ganz "irdischen" Dingen wie Drehimpuls oder magnetischem Moment zu tun.
- Zehn Sekunden oder so darf man jetzt mal kurz innehalten und darüber nachdenken, was genau eine physikalische Größe oder Eigenschaft "anschaulich" "irdisch" oder "gewöhnlich" macht.
1 - 2 - 3 - 4 -
- Genau! **Einerseits** ist es das was unsere (extrem beschränkten) Sinne uns direkt vermitteln. Dazu haben wir dann eine unmittelbare Beziehung, die direkt in die "Wertung" des jeweiligen Phänomens einfließt.
- "**Licht**", zum Beispiel, kennt jeder und hat deshalb keine Angst davor. Nicht direkt wahrnehmbare **elektromagnetische Wellen**, wie die Mikro- und Radiowellen, sind schon viel abstrakter. Deshalb fürchten "wir" uns auch nicht vor einer **1000 W** Glühbirne auf einem Lichtmast, wohl aber vor einem **100 W** Mikrowellensender, der wie jeder weiß ungesunden **Elektrosmog** erzeugt.
- **Andererseits** sind "anschauliche" physikalische Größen einfach alles, an das wir uns im Laufe der Zeit auch ohne direkte Wahrnehmung gewöhnt haben. Was genau ist eigentlich **Ladung**? Aha!

Was also **ist** der Spin?

- Was immer der Spin auch ist, auf **1 - 2** Seiten läßt es sich nicht sauber und geschlossen darstellen. Wir beschränken uns im folgenden deshalb auf einige Schlüsselbegriffe, etwas unsystematisch und anekdotisch dargestellt, die noch mit Links zu etwas mehr fortgeschritten Seiten zu diesem oder jenem Unterpunkt versehen sind.

Drehimpuls und magnetisches Moment

Mutter Natur ist gelegentlich launisch (ob sie wohl deswegen allgemein als weiblich empfunden wird?) Sie hat zwar eine elektrische Ladung "gemacht", die dann ein elektrisches Feld produziert, aber aus (immer noch) unerfindlichen Gründen keine magnetische Ladung - es gibt offenbar keine "magnetischen Monopole". Man hat jedenfalls bisher keine gefunden - trotz langer, sehr teuer und noch nicht abgeschlossener Suche.

- Magnetfelder haben ihre makroskopischen Quellen deshalb immer im elektrischem **Strom** - d.h. in (elementaren) Ladungen, die sich irgendwie **bewegen**.
- Besonders übersichtlich ist die Lage, wenn der elektrische Strom im Kreis herum fließt - typischerweise in einem zu einem Kreis gebogenen Leiter oder eben in den vielen Kreisen der klassischen "Induktivität", vulgo Spule genannt.

Das im Bohrschen Atommodell auf einer Kreisbahn um den Atomkern rennende Elektron erfüllt die obigen Kriterien aber auch - wir können es als einen im Kreis fließenden Strom I betrachten, und es **muß** deshalb ein Magnetfeld produzieren, es kann nicht anders.

- Das war sowohl Bohr als auch seinen Zeitgenossen klar. Damit hat jedes "Bohrsche" Elektron unvermeidlich auch ein "magnetisches Moment" $\underline{\mu}$, einfach definiert als polarer Vektor

$$\underline{\mu} = I \cdot \underline{A} = - \frac{e}{2m_e} \cdot \underline{D}$$

- Mit $A = \pi r^2$ = Fläche des zur Kreisbahn gehörenden Kreises; m_e = Ruhmasse des Elektrons, $\underline{D} = n \cdot \hbar$ der ([nach Bohr gequantelte](#)) Drehimpuls. Wie man auf diese Beziehung kommt (es ist ganz einfach) kann man im [Link](#) nachlesen.

Setzt man den kleinstmöglichen erlaubten Drehimpuls ein ($= \hbar$), erhält man das kleinstmögliche magnetische Moment eines "kreisenden" Elektrons.

- Dieses minimale magnetische Moment hat einen eigenen Namen, es heißt "**Bohrsches Magneton** μ_{Bohr} " und ist für den Magnetismus sowas wie die Elementarladung für die Elektrizität. Wir haben

$$\mu_{\text{Bohr}} = \frac{e}{2m_e} \cdot \hbar = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$$

■ Nun müssen sich drei Fragen aufdrängen:

- 1. Wie ist das in der "richtigen" Quantenmechanik? Das Bohrsche Modell war ja nur ein Zwischenschritt auf dem Weg zur "richtigen" Beschreibung des Elektrons mit Wellenfunktion - und dann ist es aus mit anschaulichen Strömen und Kreisflächen!
- 2. So denn das im Atom wie auch immer herumeiernde Elektron tatsächlich ein magnetisches Moment haben sollte: Was sagt das Experiment? Wie kann man es messen?
- 3. Was hat das alles mit dem Spin zu tun?

Experimentelle Zwänge und Einführung des Spins

■ Die 1. Frage ist schnell beantwortet:

- Auch in der "richtigen" durch die Schrödingergleichung beschriebenen Quantentheorie, haben die im Atom steckenden Elektronen magnetische Momente (die allerdings auch mal = 0 sein können). Und sie haben auch einen Bahndrehimpuls, der wiederum mit dem magnetischen *Bahn* moment verknüpft ist. Es ist quantisiert, und tritt in "Quanten" auf, die durch Nebenquantenzahl **l** und magnetische Quantenzahl **m** (in etwas trickreicher Weise) gegeben sind.
- Die Nebenquantenzahl definiert die erlaubten Eigendrehimpulswerte zu einem durch die Hauptquantenzahl gegebenen Grundzustand, und die magnetische Quantenzahl bestimmt, wieviele Möglichkeiten der Anordnung der jeweilige Drehimpuls in einem Magnetfeld hat. Für **l = 2** gibt es beispielsweise 5 Möglichkeiten für **m**.

■ Nun zur Frage 2. und 3.

- Ja, man kann das magnetischen Bahnmoment messen - indem man schaut, was die Elektronen des Atoms so "tun", wenn man sie in ein externes Magnetfeld bringt. Diesbezügliche Messungen, die dazu schon früh durchgeführt wurden, führen dann ganz schnell zum *Spin* - und damit zur Antwort auf die 3. Frage.

■ Das Ergebnis der Messungen war: Magnetisches "Bahnmoment" und einige der Messungen dazu passen einfach nicht zusammen - und das auch schon bevor es die Schrödingergleichung gab, nämlich im Rahmen des von **Sommerfeld** erweiterten Bohrschen Modells (das wie bei den Planeten auch Ellipsenbahnen zuließ).

- Im Sommerfeldschen Modell kommt eine *zweite* Quantenzahl zum Einsatz, **Bahndrehimpulsquantenzahl l** genannt, die die möglichen "Ellipsenbahnen" zu jeder Bohrschen Quantenzahl n (jetzt *Hauptquantenzahl* heißen) beschreibt (und im wesentlichen das war, was wir jetzt Nebenquantenzahl nennen).
- Das magnetische Moment im Sommerfeldschen Modell war an die Bahndrehimpulsquantenzahl **l** gekoppelt, nicht an **n**. Das bleibt in übrigen auch so in der "korrekten" Theorie, die aus der Schrödingergleichung mit Magnetfeld folgt (wobei dann auch noch, wie man zu Recht vermuten wird, die "magnetische Quantenzahl" **m** mitwirkt).

■ Dumm war nur schon ganz früh, daß man experimentell auch dann ein magnetisches Moment finden konnte, wenn eigentlich gar keines da sein sollte weil **l = 0** war. Das Stichwort dazu ist: "**Stern-Gerlach-Experiment**".

- Es gab noch andere Ungereimtheiten in dieser Richtung, und das war besonders ärgerlich, weil in vielen anderen Experimenten alles prima den Erwartungen entsprach. Aber *ein* unwiderlegbares experimentelles Ergebnis reicht halt aus, um ein ganzes Theoriegebäude zu Fall zu bringen (natürlich nur in Naturwissenschaft und Technik und keinesfalls in anderen Sparten, z.B Theologie).
- Die Experimente waren nur zu verstehen, wenn man *postulierte*, daß die gemessenen magnetischen Momente der Elektronen in Atomen zwar von den "Bahndrehimpulsen" herrühren konnten, aber auch noch von einem davon gänzlich unabhängigen Effekt, nämlich von einem **Eigendrehimpuls** des Elektrons, und damit verbunden einem **magnetischen Moment** des Elektrons *an sich*.
- Oder vielleicht auch umgekehrt: Ein "eigenmagnetisches Moment" des Elektrons, und damit verbunden ein Eigendrehimpuls? Was ist Henne, was ist Ei?

■ Wie auch immer, das war das Postulat, **1925** von **Uhlenbeck** und **Goudsmith** aufgestellt, das nicht nur alle damals offenen Rätsel löste, sondern sehr viel weiter trug - es ist halt einfach die Wahrheit!

- Man kann das sauber mathematisch darstellen: Wir bezeichnen den *Eigen*drehimpuls mit **S**; er ist selbstverständlich ein (polarer) Vektor. Wir haben dann folgende Gleichungen:

$$|\underline{S}| = \left(s \cdot (s + 1) \right)^{1/2} \cdot \hbar$$

s = Spinquantenzahl des Teilchens

$$s_{\text{Elektron}} = \frac{1}{2}$$

$$\mu_{\text{Elektron}} = g_e \cdot \frac{e}{2m_e} \cdot \underline{S}$$

$$g_e = 2,00231928$$

- Die Formulierungen sind bewußt allgemein gehalten, sie gelten für **alle** Elementarteilchen. Der jeweilige **Spin** wird charakterisiert durch die Spinquantenzahl **s** (die auch = **0** sein kann) und das **gyromagnetische Verhältnis g** (das natürlich für (ruh)masselose Teilchen nicht definiert ist).
- Der große Unterschied zum magnetischen Moment aus dem Bahndrehimpuls ist nur, daß es nur **einen** Wert für die Spinquantenzahl gibt, eben **s_{Elektron} = 1/2**. Das führt dann auf genau **zwei** Möglichkeiten der Einstellung des Spins: "Rauf" oder "runter" - entsprechend der zwei Werte der Wurzel in obiger Gleichung.
- Erst an dieser Stelle kommen die immer angeführten **zwei** Elektronen pro Zustand ins Spiel.

Das gyromagnetische Verhältnis **g_e** ist nun stark problematisch:

- 1. Zunächst ist es keine ganze Zahl, wie man eigentlich erwarten sollte, sondern ein klein bißchen, aber doch signifikant, von **2** verschieden. Warum - das war eine gute, heftig nobelpreisträchtige Frage, die dann erst in der **Quantenelektrodynamik** gelöst wurde.
- 2. Aber auch ein Wert = **2** ist im klassischen Analogon nicht zu erklären. Ein im Kreis laufendes geladenes klassisches Teilchen würde ein magnetisches Moment mit **g = 1** produzieren - auch wenn das "im Kreis laufen" nur eine Drehung um die eigene Achse bedeutet.

Jetzt müßte es klingeln. Wie soll man sich ein Elektron vorstellen, das sich um die eigene Achse dreht?

- Als homogene Kugel mit Radius **r_{Elektron}** und einer Ladung **-e**, die - ja was eigentlich? Homogen in der Kugel verteilt ist? Homogen über die Oberfläche geschmiert ist? Als ein mathematischer Punkt irgendwo in oder auf der Kugel sitzt? Mehrere Punkte mit entsprechend kleinerer Ladung irgendwie verteilt? Vielleicht ist das Elektron auch gar keine Kugel, sondern ein Tetraeder oder ein Donut?
- Was immer man sich vorstellen kann (und man kann sicher sein, daß irgendjemand das bereit ausgerechnet hat) - **es funktioniert nicht**. Falls man irgendeine Konfiguration findet, die bei der Beziehung zwischen Eigendrehimpuls und magnetischem Moment in die richtige Richtung geht, wird mit Sicherheit etwas anderes schiefliegen (z.B. die Energie unendlich werden).
- Es gilt ein ähnlicher Erhaltungssatz wie bei Autoreisen mit einer Schar kleiner Kinder (Eines kotzt immer). In jeder denkbaren Konfiguration steckt immer irgendwo ein tödliches Problem.

Also sind wir gezwungen, den Spin als eine Elementareigenschaft zu betrachten, der sich eben **nach außen** in der Form eines Eigendrehimpulses und/oder eines magnetischen Momentes äußert.

- Aber so wie wir alle hoffen mehr zu sein als das was man von außen sieht, ist auch der Spin mehr als seine äußeren Erscheinungsformen. Das wird klar, wenn man das **Photon** betrachtet: es hat einen Spin **s = 1**, kein magnetisches Moment (wg. **m = 0**), und was ein mechanischer Drehimpuls dann bedeutet, ist zumindest unklar.

Dirac Gleichung und extreme Abstraktion

Die Schrödingergleichung war **nicht** mit der speziellen Relativitätstheorie vereinbar. An sich war das kein Problem, denn prinzipiell war klar, wie man vorgehen mußte, um die entsprechenden Erweiterungen vorzunehmen.

- Bei den entsprechenden Rechnungen lief man jedoch sofort und mit voller Wucht in einer Sackgasse gegen die Wand: Schon nach den ersten Zeilen kommt folgende Formel hoch:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-c^2 \cdot \hbar^2 \cdot \Delta + m_0^2 \cdot c^4 \right)^{1/2} \cdot \psi$$

- Δ ist der Deltaoperator ($\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$), **m₀** die **Ruhemasse** des betrachteten Teilchens, **c** die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum.

■ Nun können wir uns zwar vorstellen, wie man den Deltaoperator auf irgendeine Funktion anwendet, aber nicht so recht wie man das mit der **Wurzel** aus einem Operator tut.

- Den damaligen Physikern und Mathematikern ging es auch nicht besser. Ohne eine **neue** Sache kommt man nicht weiter. Es war dann **Dirac** um **1928**, der die richtige Idee hatte, die dann auch funktionierte:
- Man kann die Wurzel für zwei Spezialfälle umgehen: Entweder der Impuls des Teilchens ist $= 0$ und wir haben Lösung **[1]**, oder die Ruhmasse ist $= 0$ und wir haben Lösung **[2]**. Machen wir doch einfach den Ansatz, daß die Lösung **[All]** für den allgemeinen Fall aus einer Überlagerungen dieser beiden Spezialfälle besteht, also symbolisch geschrieben:

$$[All] = \alpha \cdot [1] + \beta \cdot [2]$$

- So weit so gut, aber man sieht sehr schnell, daß sich Bedingungen für α und β ergeben, die sich einfach nicht erfüllen lassen, außer --
- ---**außer**, α und β sind keine (reellen oder komplexe) **Zahlen**, sondern **Matrizen**!!!!

■ Hier begegnet uns in Reinkultur (mal wieder, aber bisher haben wir es nicht gemerkt) das wohl tiefste Rätsel des Universums: Warum ist die Mathematik so unglaublich gut geeignet, das Universum zu beschreiben? Denn für die relativistisch korrekte Beschreibung der Wellenfunktion braucht man schlicht und ergreifend Matrizen; es geht nicht anders, und es wird durch die Mathematik regelrecht erzwungen.

- Löst man dann die jetzt erhaltene **Dirac-Gleichung** für ein simples Elektron, das weiter gar nichts tut, erhält man **4** mögliche Lösungen, davon zwei mit **negativer** Energie und zwei mit positiver Energie, getrennt durch eine **Energielücke** von genau $2m_0 \cdot c^2$.

■ In dieser, aus der Einführung von Matrizen stammenden Lösungsmannigfaltigkeit, verbergen sich zwei neue, extrem fremdartige, aber trotzdem reale Eigenschaften der Wellenfunktion eines schlichten Elektrons (oder Protons, oder):

- 1. Es hat eine eingebaute Eigenschaft, die zu jeder der beiden Energiewerte **zwei** Zustände generiert - das ist der **Spin**, der dann auch genauso herauskommt, wie man es (experimentell) schon kannte.
- 2. Zu jedem Elektron (oder jedem anderen Elementarteilchen) gibt es ein **Antiteilchen**. Das ist aber **nicht** das Teilchen mit der negativen Energie. Denn es kann keine unmittelbare Symmetrie zwischen den Zuständen mit positiver und negativer Energie geben.
- Denn damit unser Universum (mit **positiver** Energie) nicht sofort kollabiert, weil alle Teilchen sich auf ein günstigeres, weil energetisch tieferes **negatives** Niveau begeben, müssen wir fordern, daß **alle** Zustände bei negativer Energie mit Teilchen besetzt sind. Damit nehmen wir sie gar nicht war - sie bilden den unsichtbaren Hintergrund eines absoluten Vakuums.
- Nur wenn eines der "Negativenergieteilchen" durch ausreichende Energiezufuhr auf einen Zustand mit positiver Energie befördert wird, können wir neben dem "aus dem Nichts" entstandenen Teilchen den jetzt leeren Platz im unendlichen See der negativen Zustände als **Antiteilchen** wahrnehmen.

■ Und wieder mal gilt: **Fact is stranger than fiction** - kein Romanautor, "science fiction eingeschlossen" - hätte sich sowas auch nur träumen lassen!

Pauli-Prinzip

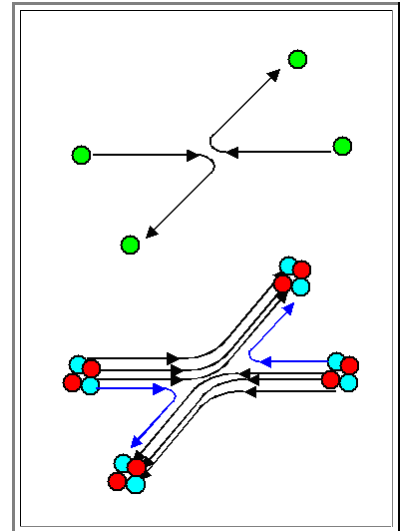
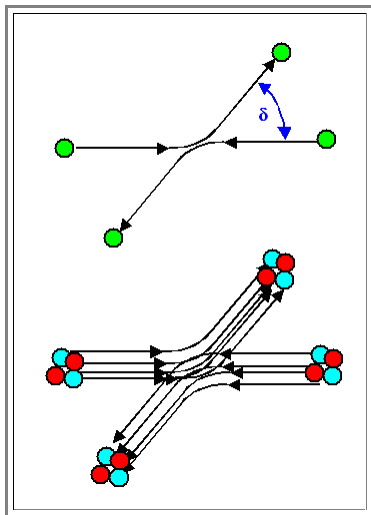
Advanced

Es gibt, wie schon an anderer Stelle ausgeführt, keine einfache und sofort einleuchtende Erklärung zum Pauli Prinzip. Man kann es jedoch mit anderen Eigenschaften von Elementarteilchen korrelieren und dann etwas tiefergründiger formulieren.

Entscheidend ist zunächst die Tatsache, daß Elementarteilchen *prinzipiell* ununterscheidbar sind. Das leuchtet zwar irgendwie ein, aber im Grunde ist es ein Axiom.

Das hat viele Konsequenzen, eine davon ist sofort einsichtig.

Wir lassen mal gedanklich zwei Elementarteilchen derselben Sorte - zwei Elektronen - oder zwei identische Kombinationen z.B. - zwei α - Teilchen (= zwei **He** Kerne) wie Billardkugeln aufeinanderstoßen. Ein mögliches Ergebnis ist im Bild *links* unten dargestellt



Die Bestandteile des α Teilchens sind zwei rote Protonen und zwei blaue Neutronen

Der Stoß ist bei gleichen Impulsen und Energien symmetrisch, mit entsprechenden Detektoren finden wir die Teilchen an den Positionen wie eingezeichnet.

Da aber die einzelnen Teilchen *prinzipiell* ununterscheidbar sind, hätte der Stoß bei identischen Ausgangsbedingungen auch wie rechts eingezeichnet stattfinden können (bei den α Teilchen wurde z.B ein Neutron ausgetauscht)

Es gibt offenbar für einen gegebenen Streuwinkel δ mehrere *prinzipiell ununterscheidbare* Wege zu ein und demselben Endergebnis am Ort des (nicht eingezeichneten) Detektors.

Das bedeutet in der formalen Sprache der Wellenfunktion, daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude für Streuung unter einem bestimmten Winkel δ , also $\psi(\delta)_n \cdot \psi(\delta)^*_n$ für jeden spezifischen Weg n der zum selben Ergebnis am Ort des Detektors führt, identisch sein muß.

Für die Wellenfunktionen selbst bedeutet das, daß sie bis auf einen Phasenfaktor $\exp i\phi$, der bei der Betragsquadratbildung herausfällt, identisch sein müssen, d.h.

$$\psi(\delta)_n = \psi(\delta)_m \cdot \exp i\phi_{n,m}$$

Betrachtet man nun konkrete Fälle, erhält man Aussagen über die möglichen Phasenfaktoren $\exp i\phi$.

Das ist aber noch nicht so spannend. Denn bisher haben wir keinen Spin berücksichtigt. Wenn wir jetzt noch zulassen, daß die Teilchen einen Spin haben (und wir im Detektor den Spin messen), könnten wir vielleicht die diversen Möglichkeiten doch unterscheiden.

Könnten wir, aber wir können das Spielchen jetzt auch noch erweitern. Schauen wir uns den Stoß zwischen zwei Elektronen jetzt nochmal an:

Wir könnten jetzt viele Prinzipbilder malen: Erstes Elektron mit Spin "Up", zweites Elektron mit Spin "Down" - und umgekehrt. Wir erwarten bei Vertauschung von Elektron 1 und 2 natürlich keinen Unterschied im Ausgang des Experiments. Dann haben wir noch die Möglichkeit, daß beide Spin "up", oder beide Spin "down" haben.

Wenn man alle Möglichkeiten durchdekliniert, wird es langsam eng für die Möglichkeiten, die für den Phasenfaktor noch bleiben. So eng, daß in voller Allgemeinheit (für alle möglichen Teilchen mit allem möglichen Spins) nur noch *zwei* Phasenfaktoren übrig bleiben:

$$\exp i\phi = \begin{cases} +1 & \text{Bose Teilchen} \\ -1 & \text{Fermi Teilchen} \end{cases}$$

- Mutter Natur hat nun aus Gründen die nur sie kennt, **beide** der logisch möglichen Fälle realisiert. Das Pluszeichen gilt für alle **Bosonen**, also Teilchen mit ganzzahligem Spin, das Minuszeichen für alle **Fermionen**, also Teilchen mit halbzahligem Spin.
- Man kann das ganze noch etwas "anschaulicher" darstellen. Der entscheidende Gedanke bei den hypothetischen Streuexperimente war, daß man alle möglichen Parameter in der Ausgangssituation austauschen kann, ohne daß sich am Ergebnis etwas ändern darf.
- Das bedeutet, daß wenn man in einer der relevanten Wellenfunktionen bei den Variablen welche "tauscht", z.B. die Positionsvektoren der beiden Teilchen oder ihre Spinrichtung, wird aus der alten Wellenfunktion $\psi(\text{vor Vertauschung})$ eine neue Wellenfunktion $\psi(\text{nach Vertauschung})$, und diese Operation läuft **immer** nach folgendem Muster ab:

$$\psi(\text{nach Vertauschung}) = \begin{cases} \psi(\text{vor Vertauschung}) & \text{Bose Teilchen} \\ -\psi(\text{vor Vertauschung}) & \text{Fermi Teilchen} \end{cases}$$

- Haben wir damit das Pauli-Prinzip erklärt?
- Haben wir natürlich nicht. Wir haben es nur anders formuliert. Wir haben zwar verstanden, daß für ununterscheidbare Teilchen prinzipiell zwei Möglichkeiten existieren, wie sie sich bei Interaktionen verhalten können.
- Warum sie sich je nach Halb- oder Ganzzahligkeit ihres Spins für jeweils eine der beiden Möglichkeiten entscheiden - das ist aber immer noch völlig unklar und keine unmittelbare Konsequenz aus anderen tiefen Prinzipien.

Energieminimierung als treibende Kraft

Advanced

- Sind alle Reaktionen, alle Veränderungen, das Ergebnis des Bestrebens eines Systems, seine **Energie** zu vermindern? Schauen' mer mal:

 - Falls der Energieerhaltungssatz **im System** erfüllt ist, tut sich energetisch nichts; das System kann seine Energie nicht senken, allenfalls in verschiedenen Arten umwandeln.
 - Eine Kugel (eine Lawine, ein Fahrrad, ein VW Käfer seligen Angedenkens) rollt den Berg zwar **hinunter**, aber ohne Reibung geht's wieder einen Berg hinauf. Die Energie kann gar nicht vermindert werden - wo soll sie hin?
- Kann Energie jedoch als **Wärme** zu- oder abgeführt werden, sieht es anders aus: Mit **Reibung** (= Wärmeabfuhr aus der Kugel in die Umgebung) bleibt die Kugel (und alles andere auch) schließlich **unten** liegen.

 - Die potentielle Energie der Kugel wird kleiner, die Überschussenergie ist nicht mehr im System Kugel sondern woanders; **das Prinzip stimmt**.
- Aber betrachten wir ein anderes Beispiel:

 - Ein Stück Eis wird auf eine Temperatur knapp über dem Schmelzpunkt gebracht. Es schmilzt. Der Umgebung wird Wärme entzogen, die Wassermoleküle, die im Eis relativ ruhig auf ihren Plätzen saßen, sind jetzt in rascher Bewegung.
 - Die Energie im System Eis/Wasser ist auf Kosten der Umgebung gestiegen; **das Prinzip stimmt nicht!**
- Ein Beispiel soll genügen. Das obige Prinzip ist also nicht ganz richtig; es genügt nur für die rein mechanische Betrachtung von "Massenpunkten".

 - Was in komplizierteren Systemen wirklich minimiert wird ist die **freie Energie**; eine Mixtur aus Energie und "Unordnung"; wir werden das in Kapitel 5 noch ausführlich kennenlernen.
- Für die Zwecke des Kapitels 2 genügt es aber, als treibende Kraft **nur** die Energieminderung zu betrachten.

Elektronegativität

Elektronegativität nach Pauling

Advanced

Die Elektronegativität der Elemente wurde von verschiedenen Wissenschaftlern in verschiedener Weise definiert. Am bekanntesten ist die Definition von Linus **Pauling**. Sie nutzt eine allgemeine Beobachtung:

- Die Dissoziationsenergie E_D , die benötigt ist, um die Atome **A** und **B** in dem Molekül **AB** mit einer polaren Atombindung voneinander zu trennen, ist größer als die "mittlere" Dissoziationsenergie E_D der Moleküle **A₂** und **B₂**, oder

$$E_D(AB) < 1/2\{E_D(A_2) + E_D(B_2)\}$$

- Anders geschrieben heißt das

$$E_D(AB) = 1/2E_D(A_2) + 1/2E_D(B_2) + \Delta$$

- Δ hängt von der Polarität der Bindung ab. Je polarer die Bindung, desto grösser ist Δ .

Pauling postulierte, daß Δ dem **Quadrat** der Elektronegativitäts-**Differenz** $X_A - X_B$ proportional sei.

- Mit dem willkürlichen "Nullpunkt" **X(Fluor) = $X_F = 4$** , und um für die Dissoziationsenergien die Einheit **kJ/mol** zu bekommen, ergibt sich (mit etwas Willkür) die Formel

$$\Delta = 96 \text{ kJ/mol} \cdot (X_A - X_B)^2$$

- Edelgase haben damit **keine** Elektronegativität, da sie keine Bindungen eingehen und somit auch keine Dissoziationsenergien haben.

Es gibt aber auch eine ganze Reihe von andern Definitionen, die dann etwas andere Zahlenwerte liefern. Hier noch zwei weitere Definitionen in Kurzform; wer mehr wissen will, kann zur Quelle gehen mit folgendem Link: <http://www.vcs.ethz.ch/chemglobe/general/chembindung/en.html#definition>

EN-Skala von Allred und Rochow

Angenommen wird, daß **X** proportional zur elektrostatischen Anziehungskraft **F** ist, die von der Kernladung **z** auf die Bindungselektronen ausgeübt wird.

- Da die Kernladung aber für die Bindungselektronen nur teilweise "sichtbar" ist (sie wird ja von den inneren Elektronen abgeschirmt), bleibt nur **z_{eff}** als effektive Kernladung. Damit gilt

$$F = \frac{z_{\text{eff}} \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2}$$

- Für die Elektronegativität folgt bei bestmöglicher Anpassung an die "Pauling" Werte

$$X = \frac{3590 \cdot z_{\text{eff}}}{r^2} + 0,744$$

- Wobei der Atomradius **r** in **pm** und **z_{eff}** als entsprechende Zahl an Elementarladungen einzusetzen ist.

EN Skala von Mulliken

■ Mulliken fand, dass die **EN** eines Atoms der Differenz seiner [Ionisierungsenergie](#) I und seiner [Elektronenaffinität](#) A proportional ist.

- In anderen Worten: Die Tendenz eines gebundenen Atoms, die Bindungselektronen an sich zu ziehen steigt mit Fähigkeit dieses Atoms, sein eigenes Elektron festzuhalten *und* zusätzlich ein neues aufzunehmen.
- Bei Anpassung an die Pauling Werte erhält man

$$X = 0,168 \cdot (I - A) - 0,207$$

- Wobei für I und A die Zahl für die Dimension **[eV]** einzusetzen ist.

■ Man kann die Pauli-Skala natürlich auch ignorieren und die Mulliken-Elektro negativität in absoluten **[eV]** Einheiten angeben via

$$X_{\text{abs}} = \frac{I - A}{2}$$

■ Man fragt sich natürlich, ob diese recht verschiedenen Definitionen halbwegs identische Zahlen liefern - und falls ja, warum? Aber wir wollen das nicht weiter vertiefen (Das heißt im Klartext: Ich weiß es auch nicht).

Die wahren Bohrschen Postulate

Basics

Entgegen der üblichen Textbuchweisheit, hat **Bohr nicht** die Quantelung des Drehimpulses postuliert, sondern **drei** Postulate aufgestellt, von denen insbesondere die sogenannte **Komplementarität** wichtig war.

- Was das bedeutet und wie man damit zum Bohrschen Atommodell kommt, entnehmen wir (in Kurzform) dem großartigen Buch "[Atom- und Quantenphysik](#)" von **Haken** und **Wolf** aus Stuttgart (bei denen ich mal Physik studierte).

Bohr startete mit der Gesamtenergie des "kreisenden" Elektrons

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m \cdot r^2 \cdot \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r}$$

- Aus dem Kräftegleichgewicht

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} = m \cdot r \cdot \omega^2$$

- läßt sich r als Funktion der anderen Variablen ausdrücken. Eingesetzt in die Energieformel ergibt sich der etwas unhandliche Ausdruck

$$E = - \frac{1}{2 \cdot (4\pi\epsilon)^{2/3}} \cdot (e^4 \cdot m \cdot \omega^2)^{1/3}$$

Noch ist alles klassisch, **alle** Energien und Kreisfrequenzen sind möglich. Die Frequenz des abgestrahlten Lichts wäre direkt durch die Umlauffrequenz $\nu = \omega/2\pi$ gegeben. Da das nicht hinhaut, braucht man jetzt neue Axiome oder Postulate. Bohr hat an dieser Stelle **drei** Postulate aufgestellt.

- 1. Postulat** Es sind nur bestimmte diskrete Bahnen aus der unendlichen Vielfalt der durch die Formeln gegebenen erlaubt. Die erlaubten Energien sind E_n mit $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
- 2. Postulat.** Die Frequenz der ausgesandten Strahlung ergibt sich aus der **Energiedifferenz** der erlaubten Bahnen, d.h.

$$h\nu = E_n - E_{n'}$$

Das nützt aber alles noch nichts - es fehlt das alles entscheidende Auswahlkriterium für die erlaubten Bahnen oder Energien

- Also kommt jetzt erstmal das Experiment zu Hilfe. Die Frequenz des vom Wasserstoffatom ausgestrahlten Lichtes war bekannt, alle Spektrallinien folgten mit großer Präzision der empirischen Formel

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- mit λ = Wellenlänge ($1/\lambda$ heißt **Wellenzahl**) und R_{ex} = experimentell sehr genau ermittelte **Rydberg Konstante** = $109\,677,5810 \text{ cm}^{-1}$.
- Durch Vergleich ergibt sich unmittelbar

$$E_n = - \frac{R \cdot h \cdot c}{n^2}, \quad E_{n'} = - \frac{R \cdot h \cdot c}{n'^2}$$

Als nächstes muß die Rydberg Konstante **theoretisch** bestimmt werden, das war die eigentliche Herausforderung. Für einen ersten Ansatz lag nahe, die Umlauffrequenzen der Elektronen und die Frequenzen der emittierten Strahlung für die mit den möglichen Sätzen für n und n' ausgewählten Bahnen gleichzusetzen und dadurch einen **theoretischen** Wert für die Rydbergkonstante zu erhalten.

- Es ist aber schnell zu sehen, daß man insbesondere für kleine Bahnradien hier weit daneben liegt. Die Lösung bringt das **3. Bohrsche Postulat**, das "**Korrespondenzprinzip**":

3. Postulat Für "große" Parameter, hier Bahnradien, gilt die klassische Physik (zumindest in guter Näherung).

Die experimentelle Gleichung für die Wellenzahl ergibt (in Frequenzen ausgedrückt) für große **n** (für die das 3. Postulat gelten sollte) und $\Delta n = 1$

$$v = \frac{c}{\lambda} \approx \frac{2 \cdot R \cdot c}{n^3}$$

$$\omega = 2\pi v \approx \frac{4\pi \cdot R \cdot c}{n^3}$$

- Diese Frequenz sollte, bei Gültigkeit des Korrespondenzprinzips, identisch sein mit der Umlauffrequenz für große Bahnen. Der entscheidende Gedanke ist jetzt, diesen Ausdruck für die Kreisfrequenz in die [obige Energieformel](#) einzusetzen. Wir erhalten dann den folgenden geschachtelten Ausdruck für die Rydberg Konstante **R**

$$\frac{R \cdot h \cdot c}{n^2} = \frac{1}{2 \cdot (4\pi\epsilon_0)^{2/3}} \cdot \left(e^4 \cdot m \left(\frac{4\pi \cdot R \cdot c}{n^3} \right)^2 \right)^{1/3}$$

- Das ganze vereinfacht sich dann zu dem **theoretischen** Wert für die Rydberg Konstante

$$R_{\text{theo}} = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 c} = 109\,737,318 \text{ cm}^{-1}$$

- Und das ist zunächst gut genug - schließlich ist das Proton als ruhend angenommen, während in Wahrheit Proton und Elektron um den gemeinsamen Schwerpunkt kreisen. Wird dieser Effekt berücksichtigt (das ist relativ einfach), ergibt sich **$R_{\text{theo}} = 109\,677,584$** - bis auf 7 Stellen der experimentelle Wert!

Ein größerer wissenschaftlicher Triumph ist schwer vorstellbar. Der Rest folgt nun schnell:

- Die Bahnradien **r_n** als Funktion der Hauptquantenzahl **n** sind

$$r_n = \frac{n^2 \cdot h^2 \epsilon_0}{\pi \cdot e^2 \cdot m}$$

Der Drehimpuls wird damit

$$D = m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2\pi}$$

- Das ist die "Quantelungsbedingung" für den Drehimpuls, die jetzt "herauskommt", und nicht postuliert werden muß.
- Die Erkenntnis, daß die Quantelung des Drehimpulses als Eingangspostulat schneller zum Ziel führt ist klar - jedoch nicht mit der gleichen Universalität wie das Korrespondenzprinzip, das von Bohr gleichsam heilig gesprochen wurde.

Pyramidenzoll

Advanced

- So ungefähr in der Mitte des **19.** Jahrhunderts eroberten die Briten sich ein Weltreich, das Empire, zu dem auch das "Protektorat" Ägypten gehörte.
- Fasziniert von den dortigen Altertümern, begann ein Forschen und Feilschen, ein Graben und Grabschen, ein Rennen und Sprengen (z.B. innerhalb der Cheopspyramide), ein Suchen, Räumen, Messen, Schreiben und Konservieren sowie ein Plündern und Rauben (ein Großteil der Sensationen in "Britisch Museum" ist schlicht illegal außer Landes geschafft worden).
- Aber auch die "Pyramidiotie", die gerade mal wieder fröhlich Urständ feiert (man suche mal nach Büchern zu dem Stichwort "Pyramiden"), hat hier ihre Wurzeln.
- Der erste **Pyramidiot**, sozusagen der Ahnherr von Legionen, war der schottische Hofastronom **Piazza Smyth**, der diesen Titel **1845** im zarten Alter von **26** Jahren erhielt.
- Kräftig geholfen bei der Karriere hat ihm **Sir John Herschel**, berühmter Astronomensohn des noch berühmteren (und deutschen) **Friedrich Wilhelm Herschel**, der **1781** den Uranus entdeckte.
- Sir John war außerdem ein "Pyramidennarr". Er hat wohl als erster ausgerechnet, wie alt die Pyramiden sein müssten, wenn man annimmt, daß sie im Jahre ihrer Erbauung exakt auf einen besonders hellen Stern ausgerichtet waren. Sein Alter von ca. **4800** Jahren ist erstaunlich gut. Richtig wären etwa **4500** Jahre.
- Piazza aber drehte völlig durch. Auf der Basis einiger Werke noch älterer Spinner und vieler eigenen "Berechnungen" schrieb er ein Pyramidenbuch ("**Our Inheritance in the Great Pyramid**"), das bis heute hunderte von Epigonenwerken inspirierte.
- Die zentrale These ist simpel: In der detaillierten Geometrie der **Cheopspyramide** ist alles, aber auch restlos alles kodiert (z.B. der Börsencrash **1928**, wie seine Nachfolger "herausfanden").
- Die Cheopspyramide (und seltsamerweise **nur** diese (es gibt über **80** Pyramiden, darunter einige ältere und fast so große)) muß deshalb göttlichen Ursprungs sein und göttlichen Willen ausdrücken (Piazza war fromm).
- Aus den vielen Maßen der Pyramide läßt sich nun als kleinstes gemeinsamer Teiler die verwendete **Maßeinheit** herausdividieren, der **Pyramidenzoll**, der damit automatisch den göttlichen Segen hat.
- Und siehe da: der Pyramidenzoll war identisch zum damals gebräuchlichen **englischen Zoll**! Die göttliche Inspiration lag sichtbar über England.
- So ganz identisch war er übrigens nicht - etwa ein Promille länger. Aber man muß natürlich auch die Meßfehler berücksichtigen. Eine Pyramidenzoll erhält man beispielsweise, indem man den Umfang der Cheopspyramide durch **364,2423** teilt (der Dauer eines Jahres in Tagen; liegt ja nahe) und dann nochmal durch **100**.
- Jedenfalls hatte Herschel, der aus irgendwelchen Gründen (und mit großem Einfluß) gegen das metrische System kämpfte (er war Mitglied der "Standard Commission"), jetzt unglaublich wirksame Schützenhilfe von Piazza Smyth:
- Das englische Maßsystem, **by God**, kam direkt von Gott! Ein Eingehen auf das metrische System; letztlich ja ein Ansinnen der gottlosen Franzosen, kam bei dieser Sachlage überhaupt nicht in Frage.
- So hirnrissig das heute klingt - Piazza Smyth hat tatsächlich einen Feldzug für das göttliche englische Zoll gestartet, der gewaltigen Wind machte und im Volk auf große Zustimmung stieß. **Das metrische System wurde abgelehnt.**
- Zur Ehrenrettung der englischen Wissenschaft muß aber gesagt werden, daß sie sich **1869 im Prinzip** für das metrische System entschied. Piazza mußte sowohl aus der "Standard Commission" als auch aus der "Royal Society" austreten - **aber gewonnen hat er doch!** Die angelsächsische Welt, insbesondere die USA, ignorierten ihre Wissenschaftler und setzen weiterhin auch heute noch auf das göttliche Pyramidenzoll.

Edel

Advanced

- Man darf sich gerne mal Gedanken darüber machen warum Edelgase "edel" sind.
- Zum Suchbegriff *Edel* findet man in einem *Internet* Lexikon folgenden Eintrag:

Synonyme: achtbar, aufopfernd, aufrecht, ausgesucht, ausgewählt, bieder, brav, charakterfest, edelmütig, ehrbar, ehrenhaft, ehrenwert, ehrsam, erlesen, exquisit, fein, fein, großherzig, hochanständig, hochwertig, idealistisch, kostbar, qualitativ, rechtschaffen, redlich, rühmend, sauber, schön, selbstlos, teuer, unbestechlich, uneigennützig, wacker, wertvoll, zart

Vergleiche: echt, hehr, human, nobel, vornehm

Ist Synonym von: adelig, adlig, adlig, altruistisch, auserlesen, auserwählt, distinguiert, edelherzig, edelmütig, erstklassig, exquisit, fein, fühlend, großdenkend, gut, hochherrschaftlich, hochherzig, hochwertig, honorig, humanitär, kostbar, lieb, liebenswert, luxuriös, präziös, qualitativ, rar, sublim, süperb, teuer, unerschwinglich, unschätzbar, vornehm, vornehm, wertvoll, wohlütig.
- Irgendwie paßt das nicht so recht auf *Edel*gase. Es hilft der "Wahrig" (Deutsches Wörter*buch*) mit der Ethymologie
 - Edel* = **Adel**; und der Bezug ist hier ganz klar zu einer der widerwärtigeren Eigenschaften der "upper class": Man hat keinen Kontakt zum gemeinen Volk; man ist etwas Besseres weil man bestimmte Namen trägt und Vorfahren hat, die früher das gemeine Volk ausgebeutet haben (oder die das in vielen Ländern immer noch tun).
 - Edelgase sind auch, wie ihre Namensgeber, relativ nutzlos. Ausnahmen gibt es natürlich hier wie da.
- Trotzdem üben Edelgase eine gewisse Faszination auf den Chemiker und Materialforscher aus, so wie auch der Adel auf's gemeine Volk.
 - Dies schlägt sich nicht nur in den zahlreichen Magazinen und Gazetten nieder, die man im Umfeld von Friseurläden und Wartezimmern findet, sondern auch in der Tatsache, daß große Bereiche der westlichen Kleidungs- und Eß"kultur" im wesentlichen die (im Grunde sehr seltsamen) Gepflogenheiten der British "Upper Class" emulieren.
 - Ein großes New Yorker Museum hat mal zum Thema Eßkultur den Zentraltisch des Festbanketts einer britischen und chinesischen Prinzessin nachgestellt: *Hier* pro Person jede Menge Silberwerkzeuge, etliche Teller, viele Gläser und protzige Silberschüsseln, Kerzenhalter, etc. in der Mitte; *dort* ein lackiertes Brettchen, ein Paar Stäbchen, und ein exquisites Pflanzenarrangement. Man fragt sich (aber nicht lange) welcher Tisch hier die höhere Kultur verkörpert.

Schrödingers Katze

Advanced

- Selbst ein Mensch mit nur minimalem Anspruch auf Bildung *muß* wissen, was sich hinter dem Stichwort "Schrödingers Katze" verbirgt. Ein Materialwissenschaftler natürlich allemal.
- Ganze Bücher wurden mit diesem Schlagwort im Titel geschrieben; es ist nach wie vor eines der zentralen und kontrovers diskutierten Paradigmen der Quantenphysik.
 - Hier ist die schnelle Suchabfrage bei der deutschen [amazon.de](https://www.amazon.de) (Okt. 2001):

Schrödingers Katze. Das Universum nebenan.
 von Robert Anton Wilson
 Versandfertig in 24 Stunden
 Rowohlt TB-V., Rnb. Taschenbuch
 Durchschnittliche Kundenwertung: ***** (absolute Spitze)
 Preis: DM 12,89; EUR 6,59

Auf der Suche nach Schrödingers Katze. Quantenphysik und Wirklichkeit.
 von John Gribbin, Friedrich Giese (Übersetzer)
 Versandfertig in 2 bis 3 Werktagen.
 Piper, Mchn. (1996) Taschenbuch
 Durchschnittliche Kundenwertung: ****1/2*
 Preis: DM 19,90; EUR 10,17

Schrödingers Katze. Einführung in die Quantenphysik.
 von Brigitte Röthlein
 Versandfertig in 24 Stunden DTV, Mchn. (1999) Taschenbuch
 Durchschnittliche Kundenwertung: ***
 Preis: DM 15,49 EUR 7,92

Wieviele Leben besitzt Schrödingers Katze? Zur Physik und Philosophie der Quantenmechanik.
 von Jürgen Audretsch, Klaus Mainzer
 Versandfertig in 2 bis 3 Werktagen
 Spektrum Akad. Vlg., Hdg. (1996)
 DM 49,90; EUR 25,51
- Was ist "*Schrödingers Katze*"? Hier der Beginn eines Artikels aus den Physikalischen Blättern vom Nov. 1997:

Schrödingers Katze in die Falle gelockt

D. Leibfried, C. Monroe und D. J. Wineland

Im Jahre 1935 veröffentlichte Erwin Schrödinger einen langen Artikel über „Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik“ [1]. Im Rahmen einer detaillierten Gegenüberstellung von klassischer Mechanik und Quantenmechanik erläuterte er darin die Gründe seines Unbehagens mit der damals neuen Theorie. Der Artikel wäre wohl in Vergessenheit geraten, enthielte er nicht einen Absatz mit der Beschreibung eines Gedankenexperiments, das unter dem Namen „Schrödingers Katze“ weit über die Physik hinaus zu Kopfzerbrechen geführt hat. Über 60 Jahre nach Schrödingers Artikel ist es möglich geworden, quantenmechanische Zustände herzustellen, die die Essenz des Katzen-Paradoxons ins Labor übertragen.

Erwin Schrödinger erläuterte in dem Artikel, wie man im Prinzip den Zustand einer Katze, eines makroskopischen Quantensystems, mit dem mikroskopischen Zustand eines Atoms verschränken kann. Eine Katze wird in eine Stahlkammer eingesperrt, zusammen mit einer „teuflichen“ Vorrichtung: ein Geigerzähler und eine radioaktive Substanz, deren Menge und Halbwertszeit so gewählt sind, daß innerhalb einer Stunde ein Zerfall mit

einer Wahrscheinlichkeit von ca. 50% stattfindet. Der Zerfall löst eine Entladung im Geigerzähler aus, deren Signal wiederum einen Hammer auf eine Zyanalkali-Ampulle fallen läßt; das entweichende Gas tötet die Katze. Angenommen, man sperrt die arme Katze in diese Apparatur und wartet eine Stunde, wie würde man den Zustand des Systems dann beschreiben? Nach den Gesetzen der Quantentheorie wäre die angemessene Form ein Superpositionszustand der Form:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{Atom zerfallen}\rangle|\text{Katze tot}\rangle + |\text{Atom nicht zerfallen}\rangle|\text{Katze lebt}\rangle). \quad (1)$$

Die Apparatur „verschränkt“ den mikroskopischen Superpositionszustand des Atoms (zerfallen und nicht zerfallen) mit dem makroskopischen Zustand der Katze. Wann ist die Katze nun tot? Ist sie in einem Schwebezustand, lebendig und tot, wie es die Quantenmechanik impliziert? Ist sie lebendig oder tot, wie unsere Alltagserfahrung uns glauben macht? Oder sind die Dinge noch komplizierter, und es bedarf eines Beobachters, der die Kiste öffnet und nachschaut, um das Schicksal der Katze zu besieghen? Das von Schrödinger illustrierte Paradoxon besteht darin, daß wir zwar quantenmechanische Superpositionszustände von mikroskopischen Systemen herstellen und beobachten können (z. B. Elektronenbeugung an einem Doppelspalt, Beugung von Teilchen mit magnetischem Moment in einer Stern-Gerlach-Apparatur, etc.), es aber keinerlei Evidenz für Superpositionszustände von toten und lebenden Katzen gibt. Anscheinend findet irgendwann auf dem Weg zwischen Atom und Katze ein Übergang statt, der Superpositionen in ein klassisches „Entweder-Oder“ verwandelt. Die Quantentheorie enthält aber keinen direkten Hinweis, wie groß oder komplex ein System sein muß, um sich klassisch zu verhalten. Für ein wirkliches Experiment scheint die vorgeschlagene Apparatur wenig geeignet, da die Katze ein enorm kompliziertes Quantensystem darstellt, ganz abgesehen von der Frage, wie man lebendig und tot als quantenmechanische Eigenschaften beschreibt. In jüngster Vergangenheit ge-

lang es aber mehreren Gruppen, in kontrollierter Weise quantenmechanische Zustände herzustellen, mit denen sich der Übergang quantenmechanisch-klassisch im Labor untersuchen läßt. Experimente mit Rydberg-Atomen in einem Mikromaser und mit einem einzelnen Ionen in einer Falle erlauben es, den Fragen nachzuspüren, die Schrödinger aufwarf.

Die Grundidee dieser Experimente besteht darin, quantenmechanische Superpositionszustände zu präparieren, deren Charakter sich kontrolliert von mikroskopisch (quantenmechanisch) bis makroskopisch (klassisch) variieren läßt. Im Rahmen der Quantenoptik wurde der Vorschlag gemacht, ein Lichtfeld in einem Superpositionszustand von zwei kohärenten Zuständen [2] mit entgegengesetzter Phase zu erzeugen,

$$\psi_\alpha = (1/\sqrt{2}) (|\alpha\rangle + |- \alpha\rangle), \quad (2)$$

wobei 2α der zu variierende Abstand der kohärenten Wellenpakete im von Ort und Impuls aufgespannten Phasenraum ist. Die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators wurden ebenfalls erstmals von Schrödinger beschrieben und werden oft als die „klassischsten“ aller Quantenzustände bezeichnet. Dies liegt daran, daß ihre Wellenpakete nicht in der Zeit zerfließen und der Schwerpunkt des Wellenpakets sich entlang der klassischen Phasenraum-Trajektorie des Oszillators bewegt. Daher genügt die komplexe Zahl α , die Amplitude und Phase der Trajektorie beschreibt, um den Zustand vollständig zu charakterisieren. Das nichtzerfließende Wellenpaket ist eine Gantiglocke in Φ und Π und hat die minimale von der Unschärfelrelation erlaubte Ausdehnung. Für $|\alpha| \ll 1$ ist die Amplitude der klassischen Schwingung kleiner als die Ausdehnung des Wellenpakets. Daher macht die Frage nach der Phase des Zustands oder nach dem Ort im Phasenraum, an dem sich der Zustand befindet, nur beschränkte Sinn. Speziell für $\alpha = 0$ ist $|\alpha\rangle$ der Grundzustand des harmonischen Oszillators, und damit gleichzeitig ein „nichtklassischer“ Eigenzustand des Zahl-

Dr. Dietrich Leibfried, Dr. Christopher Monroe und Dr. David J. Wineland, National Institute of Standards and Technology, Boulder, Colorado 80303, USA

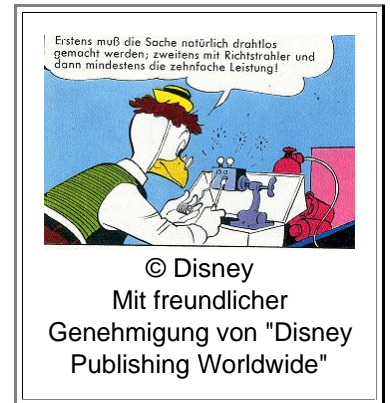
Ein besonders leicht zu lesendes Buch zum Thema ist ["Paradigms Lost"](#)

Denker und Tüftler

Advanced

Das deutsche Feuilleton unterscheidet streng und ausnahmslos zwischen **Tüftlern** und **Denkern** - es sind die Standardbezeichnungen für die fleischgewordene **Materie** einerseits, und den unbeschwerten **Geist** andererseits.

- Die Worte "tüfteln" oder "Tüftler" tauchen mit Sicherheit in jedem Zeitungsartikel zu naturwissenschaftlichen oder technischen Themen auf - spätestens wenn noch das Wort "**Patent**" dazukommt.
- Damit assoziiert wird Daniel **Düsentrieb**, der zwar leicht geniale und liebenswerte, aber auch ziemlich vertrottelte Bastler, der herumprobiert bis was funktioniert und dabei eher versehentlich auf die "Innovationen" stößt. (Der Wissenschaftler, am Rande bemerkt, ist eher das Helferlein).
- Genaugut kann man als Leitfigur auch den verschrobenen Typen nehmen, der in zahlreichen Filmen (gemacht von den bei Denkern geschulten **Kreativen**) irgendwie irgendwas Geniales austüftelt, damit aber in der Regel Ärger bekommt ("Hilfe, ich habe die Kinder geschrumpft", "Zurück in die Zukunft").
- "Tüfteln", das wird impliziert, ist etwas was jeder könnte - vor allem auch Denker - wenn man sich halt mal ein bißchen Zeit für das Trivialzeugs nehmen könnte. Aber man hat ja wichtigeres zu tun.



Die "Denker" aber - das sind die "**Philosophen**", die Leute, die sich den schwierigen und tiefen Fragen widmen ([Beispiele siehe unten](#)).

- Zum Beispiel war **Sartre** ein berühmter Denker. Er ist auch heute noch bemerkenswert, weil er (wie andere Denker inzwischen herausfanden) mit schlafwandlerischer Sicherheit **immer** auf der falschen Seite der Wahrheit stand.
- Auch **Aristoteles** war ein großer Denker - obwohl er, soweit es die Naturwissenschaft betraf, **immer** falsch gedacht hat. Und zwar auch dort, wo selbst er es seinerzeit hätte besser wissen oder zumindest besser **denken** können.
- Herr **Sloterdijk**, z.B. ist ein noch lebender großer Denker von heute. Insbesondere weil seine "Elmayer Rede" entweder rassistische Untertöne hatte, oder aber Rassismus verurteilt hat. Aus dem Text wird das offenbar nicht so recht klar, und selbst der Verfasser konnte hinterher nicht mehr erklären, was genau er eigentlich gedacht hat. (Eine google Suche zum Suchbegriff "elmayer rede sloterdijk" ergibt übrigens auf Anhieb **255** Links zur Rede - bloß die Rede selbst ist nicht dabei; offensichtlich ist sie zum darüber "philosophieren" gar nicht erforderlich).
- Das Gesamtwerk der Denker des letzten Jahrhunderts hat ein Anonymus in einem Graffiti in S. Francisco in den **80ern** umfassend zusammengestellt:

"To be is to do" (Camus)
"To do is to be" (Sartre)
"Do be do be do" (Sinatra).

- Wer meint, es sei mehr da, möge die **verbindliche** Antwort der Denker auf **eine einzige** wesentliche "Seins"frage einschicken. Vorher aber vielleicht im Internet noch kurz unter dem Stichwort "**Sokal**" oder "Sokal Affäre" nachschauen

Auch die Frankfurter Allgemeine Sonntagszeitung kann sich diese Sichtweise anschließen - am 28.9.2003 im Wissenschaftsteil. Dort lesen wir in einem Bericht zum **5. Kongreß für analytische Philosophie** (das ist der Teilbereich, der philosophische Probleme durch logische Analyse der Sprache lösen will - mit Wissenschaftlichkeit und unter Berücksichtigung naturwissenschaftlicher Erkenntnisse):

- "Gerade Peter Sloterdijks Wortakrobatik hat mit wissenschaftlicher Analyse oft herzlich wenig zu tun. Und angesichts solcher Philiosphiesimulation mag man tatsächlich manchmal den Glauben daran verlieren, dass die ehrwürdige Disziplin heute noch zu mehr imstande ist als zur Sinnbelletristik nach Art des Karlsruher Sphärenorakels".
- Herr Alexander Grau, der den Artikel verfaßt hat, geht dann ausführlich auf den Vortrag des Philosophen Holm Tetens aus Berlin ein. Herr Tetens sagte:
- "Anders als andere Disziplinen verfüge die Philosophie über kein Lehrbuchwissen, auf das man aufbauen könne. Im Grunde gäbe es keine einzige relevante philosophische Aussage, über die sich alle Denker einig sind".

Na also! Es scheint, wir Tüftler haben letztlich gewonnen, auch wenn das die Denker noch nicht gemerkt haben und in den Bastionen des deutschen Feuilletons noch Rückzugsgefechte führen. Haben wir wirklich gewonnen?

- "Oh Herr, ich danke Dir, dass ich nicht so bin wie diese", heißt es an anderer Stelle; aber der Herr, so wird berichtet, war über diesen Dank nicht erfreut. Ist "die Philosophie" wirklich unbedeutend, witzlos oder gar tot? Brauchen wir sie nicht mehr, wo wir doch fähige Naturwissenschaftler und Ingenieure haben?
- Wer dieser Ansicht zuneigen sollte, hat nicht scharf genug gedenkert. Menschsein in allen Varianten und mit allen Schnittstellen ist nicht logisch und naturgesetzmäßig - **Gottseidank!** Normen des Lebens und Zusammenlebens lassen sich nicht, zumindest nicht vollständig, aus Naturgesetzen und Logik determinieren.
- Welche Disziplin auch immer hier antritt - Theologie, Philosophie, Soziologie, Psychologie,...., kann und soll von uns Tüftlern mit Hohn und Spott überschüttet werden, wenn sie das verdient, aber wir sollten uns darüber klar sein, dass wir die Kerngebiete der jeweiligen Disziplin mit **unserer** Weisheit **nicht** bedienen können - aber trotzdem brauchen.
- Falls wir es trotzdem tun, dann tun wir es nicht mehr **nur** als Physiker oder Ingenieure, sondern eben **auch** als Hobby-Philosophen oder -Soziologen.

Hier wird jetzt aber was rekursiv, deswegen genug davon.

Aber nach diesen **Gedanken** noch kurz eine Bemerkung zum Thema. Der von Denkern oft geäußerten Kritik, die Physiker könnten sich nach **80** Jahren Quantentheorie immer noch nicht entscheiden, ob das Elektron nun eigentlich ein Teilchen oder eine Welle sei (d.h. es fehlt ihnen an der Schärfe der Gedanken), muß man etwa so entgegnen:

- Auf dem Planeten Slotersart leben die Aristotalen, eine Rasse, deren Augen zwar die Rezeptoren für Farbe haben, deren Verarbeitungsalgorithmus im Gehirn aber nur Schwarz-Weiß Bilder generiert.
- Den dortigen Tüftler gelang es nach langer Forschung, die Farben **im Prinzip** zu entdecken. Einige wenige konnten sogar mit größter Mühe und mit viel Übung ihre Gehirne neu konditionieren, so daß sie schließlich Farben direkt **sehen** konnten.
- Mit Begeisterung beschrieben sie ihren Zeitgenossen, daß ein Regenbogen etwas ganz anderes sei als es scheine - weder schwarz noch weiß, auch nicht nur hell oder dunkel, sondern er hätte von allem etwas, aber so richtig könne man das halt nur mit mathematischen Formeln beschreiben.

Denn die **Sprache** der Aristotalen hatte selbsterständlich niemals **Wörter** für Begriffe entwickelt die **wir** zum Beispiel mit Wörtern wie "Farbe", rot", "blau" oder "bunt" umschreiben (In der Regel ist es ja eher umgekehrt: "**Denn eben wo Begriffe fehlen, da stellt ein Wort zur rechten Zeit sich ein**"; siehe Sloterdijk).

- Für einen aristotalischen Tüftler war es also ziemlich schwierig, mit dem vorhandenen Vokabular auszudrücken was er sah, wenn er einen Regenbogen oder sonstwas erblickte. Es ging aber problemlos mit Mathematik - aber auch Formeln muß man richtig "sehen" können.
- Was geschah: Mit der neuen Entdeckung nahm die Naturwissenschaft und Technik einen ungeahnten Aufschwung. Viel neue Produkte entstanden, bei denen das Konzept "Farbe" instrumentell war. Den meisten Aristotalen war das aber egal; sie verstanden das ganze zwar nicht, aber mit den Produkten umgehen konnten sie schon.
- Die Denker allerdings, die Denker murmelten immer noch abfällig über die Tüftler: Sie sind zu denkschwach um sich endlich entscheiden zu können, ob der Regenbogen nun schwarz oder weiß ist.

Zwei Kostproben aus deutschen Feuilletons. Selbstverständlich Einzelfälle - aber es ist ziemlich einfach, die Sammlung ins Beliebige zu verlängern.

„Gegen transsubjektive und antiindividualistische Solidaritätsimperative gilt deshalb festzuhalten, dass die negative Bestätigung dominanter Zuschreibungen die (nun oppositionell inkorporierten) Subjekte nicht minder – und eher mehr – unterwirft als der präntendiert zwanglose Zwang der deliberativen Vernunft.“

Nun ist aber – offenkundig – die für unser Leben eigentlich grundlegende Dimension von Vernetzung zur puren Behauptung geronnen und aben wir lediglich – sollten wir die Augen wirklich öffnen – in Ökologie und Design [die beide eng zusammenhängen], wie vielfältig und komplex diese Herausforderung der Kooperation ist, und erkennen wir, wie wahrhaftig die Notwendigkeit der Arbeit an Vernetzung ist: Der Gegenwart und der Zukunft zuliebe, also als Grundlage schon unseres heutigen Lebens.

Fenster und Windows

Lambert Wiesing arbeitet an einer Philosophie des Bildes



Befreiung von der Physik

Natürlich geht dies nicht ohne konkrete Beispiele. Sie zeigen, dass der Bildbegriff selbst immer wieder in Frage zu stellen ist. „Da nicht jedes Kunstwerk ein Bild sein muss, kann man der Meinung sein, dass zum Beispiel in der Monochromen Malerei zwar Kunstwerke, aber keine Bilder geschaffen wurden.“ Wiesing wählte auch mit der Frage, was abstrakte Fotografie ist, oder mit der Verknüpfung der Begriffe von Fenster und Bild Beispiele, anhand derer er den Bildbegriff schärft. Innerhalb weniger Absätze verbindet er dabei Albertis Abhandlung über die Malkunst aus dem 15. Jahrhundert und das Betriebssystem „Windows“ ein unauffällig berührendes Phänomen.

Man könnte dem Autor vorwerfen, keine eigenen, geistigen Theorien zu entwickeln. Aber seine kritische Lektüre führt weiter als mancher vorsehnelte Systembau. So kann er sogar mit Platons Mimesis-Begriff eine der ältesten Bildtheorien heranziehen, die gerade wegen ihrer scheinbaren Bilderfeindlichkeit immer wieder heftig diskutiert und kritisiert wurde. Wiesing geht den Pech Schritt für Schritt durch und kommt zum Ergebnis, dass Platon nicht über Bilder spricht, sondern über Nachahmung im Sinne von billiger, einfallsloser Imitation. Platon verdammte also nicht Bilder sondern die kategoriale Verwechslung, Bilder als Imitationen anzusehen.

Das Buch endet mit der aktuellen Frage, „Was sind Medien?“ mit der die boomende Medienwissenschaft kritisch beleuchtet wird, um mit einer verblüffend einfachen Antwort zu enden: „Medien befreien den Menschen von dem allgegenwärtigen Diktat der physikalischen Welt.“ Dem Blick auf eine physikalische Wirklichkeit zu eröffnen und die passenden Begriffe für dieses Blicken zu prägen, sind die Aufgaben, die sich Wiesings Bildtheorie stellt. Es wäre nicht die schlechteste Position einer derart praktizierten Philosophie, als Diskussionsleiter oder Art Mediator die Grundlagen der Bild- und Medienwissenschaft weiter zu präzisieren. **ANDREAS STROBL**

SZ LAMBERT WIESING: *Artifizielle Präsenz. Studien zur Philosophie des Bildes.* Nov. 2005 Sührkamp Verlag, Frankfurt am Main 2005, 164 Seiten, 9 Euro.

Hier ist wohl der Endsieg des Geistes über die Materie angepeilt.
Viel Glück auch!

- Wer glaubt, das sei einseitig und polemisch - der (oder die) hat recht. Aber so ganz allein polemisiert niemand auf dieser Welt, man betätige den [Link](#) für starke Sprüche Anderer.

Elektrische Feldenergie und der E-Modul

Advanced

Der Elastizitätsmodul **E** ist sowohl eine der wichtigsten (und leicht meßbaren) Materialeigenschaften als auch eine direkt die atomare Natur der Materie demonstrierende Größe.

- Der **E**-Modul resultiert, wie wir bereits wissen, [direkt aus dem Bindungspotential](#), das wiederum die Lösung der Schrödingergleichung für die betrachtete Bindung repräsentiert.
- Betrachtet werden dabei immer nur ein paar der äußeren Elektronen der betrachteten Atome. Bedenkt man, daß der Radius der 1. Bohrschen Bahnen oder die Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der betrachteten Orbitale gut **10.000** mal größer sind als die Größe des Atomkerns oder der Elektronen (ein [typischer Wert](#) für die Größe eines Atomkerns ist $3.4 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, ein Elektron hat den "klassischen" Radius $2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, der Bohrsche Radius liegt bei ca. $5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$), besteht die Materie im wesentlichen aus leerem Raum, mit ein paar geladenen "Punkten" darin.
- Na ja - nicht ganz richtig! Der "leere" Raum ist angefüllt mit den elektrischen Feldern der geladenen "Punkte". Jede der "Punktladungen" **q** produziert im Abstand **r** ein elektrisches Feld **E**, das gegeben ist durch

$$E = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{q}{r^2}$$

- Wir sind natürlich inzwischen schlau genug, **E** und **E** nicht zu verwechseln!

In der Nähe eines Elektrons wird man im wesentlichen nur das Feld dieses Elektrons spüren. Dieses Feld hat wie jedes elektrische Feld eine Energiedichte **E** (wir nehmen hier, aus reiner Bosheit, dreimal das gleiche Symbol, nur in anderen Farben!), die gegeben ist durch

$$E = \frac{\epsilon_0 \cdot E^2}{2} = \frac{2300 \text{ GPa}}{\pi r^4}$$

- Der Ausdruck rechts resultiert, wenn man die erste Gleichung für das Feld und die Werte für die Elementarladung und ϵ_0 einsetzt und den Radius in Å angibt. Die Energiedichte hat dann die Einheit **GJ/m³**.

Die Energiedichte **E** hat die Einheit **[J/m³]**. Die Energie des elektrischen Felds ist die Ursache für die Kraft zwischen zwei Ladungen - die Coulombkraft - weil Kraft mal Weg die Arbeit beschreibt, die man aufbringen muss, um die Energiedichte des Gesamtfeldes für den gewählten Abstand zu bekommen.

- Andersherum ausgedrückt, die Kraft ist die (negative) Ableitung der potentiellen elektrostatischen Energie für diesen Fall. [Auch nichts wirklich Neues](#).

Jetzt zurück zum **E**-Modul. Er beschreibt, was passiert, wenn wir ein Stück feldgefüllten Raum mit "Punktladungen" drin (= ein Material) nehmen, und jetzt die Ladungen etwas dichter beisammen haben wollen. Wir "drücken" oder, wenn wir es etwas weniger dicht haben wollen, "ziehen" (= Zugversuch) am Material.

- Die Einheit des **E**-Moduls ist [Pascal \[Pa\]](#); normalerweise nehmen wir Gigapascal, **GPa**. Ein Pascal war definiert als **1 Pa = 1 N/m²**. Wir können da aber noch einen Meter reinmultiplizieren, und erhalten genauso gut **1 Pa = 1 Nm/m³ = 1 J/m³**.

Aha! Der **E**-Modul beschreibt also **auch** eine Energiedichte! Welche wohl?

- Genau! es kann sich nur um die Energiedichte des elektrischen Feldes der an der Bindung beteiligten Elektronen handeln. Und zwar in Abständen **r** die so rund und roh einen Bindungsabstand beschreiben.
- Das kann man nun schnell ausrechnen, was man bekommt sieht so aus:

Abstand <i>r</i> vom Elektron [Å]	Elektrische Energiedichte E [GPa]	Kommentar
4.0	2.8	Größenordnung E -Modul von Polymeren
1.37	208	Größenordnung E -Modul von Metallen
1.0	732	Größenordnung E -Modul von Keramik / Diamant

■ Nochmal *Aha!* Der **E**-Modul beschreibt wohl tatsächlich den Teil der elektromagnetischen Energiedichte, den wir mechanisch noch ein bißchen ändern können.

- Das sind letztlich die Felder, die von den äußeren Elektronen herkommen. Die inneren Elektronen werden von "normalen" mechanische Drücken nichts merken.

Nach "The Curious World of Contact Angles and Particle Adhesion" von Robert Lacombe; in "Materials Science and Technology Newsletter", Vo. 2 No. 3 March 2006.

Besetzungssystematik

Advanced

Die Kernaussagen von [Modul 2.1.4](#) und [2.1.5](#) waren:

1. Die Lösungen (der Schrödingergleichung) werden durch einen Satz von 4 Quantenzahlen (n, l, m, s) charakterisiert, zu jedem Satz gehört eine bestimmte **Gesamtenergie** und eine bestimmte **Orbitalform**.

An dieser Aussage ändert sich nichts - sie ist so allgemein, dass sie auch allgemein gültig ist.

2. Die Gesamtenergie wächst monoton mit den Werten der Quantenzahlen.

Das stand so allerdings nicht im Modul **2.1.5**, wird aber durch das [Quantenzahlen - Energie Diagramm](#) impliziert, das hier noch mal dargestellt ist. Ein kleiner "disclaimer" unter der Figur relativierte diese Aussage etwas.

Hier schauen wir nun etwas genauer hin. Da sich sowohl die Quantenzahlen als auch die Energie aus der Lösung einer sehr komplexen, analytisch gar nicht lösbaren Differentialgleichung ergeben, gibt es erst mal keinen einsehbaren Grund, warum die Energie so simpel mit den Quantenzahlen verbunden sein sollte, wie das in der Graphik dargestellt ist. Es ist auch bei weitem nicht so simpel.

Warum stellt die Graphik die Dinge dann nicht richtig dar? Weil das in einer simplen und schematischen Darstellung nicht möglich ist.

Letztlich reduziert sich die Problematik auf die Frage, was Mutter Natur denn nun bei den Elementen wirklich macht. Anders gefragt, wenn ich die Elektronenkonfiguration eines beliebigen Elements mit der Ordnungszahl z kenne, und jetzt zum Element $z + 1$ gehe, welcher der noch nicht besetzten Zustände wird der "Richtige", d.h. der mit der niedrigsten Energie für das zusätzliche Elektron sein?

Das [Quantenzahlen - Energie Diagramm](#) so wie es gezeichnet ist gibt eine Antwort. Bis zum Element **Cl** ist die im Diagramm gegebene Antwort auch richtig. Auf **Cl** folgt **Ar**, und das relativ zum **Cl** zusätzliche Elektron des **Ar** "setzt" sich auch auf den in der Systematik nächsten Zustand **3p⁶**, d.h. es besetzt den letzten noch offenen Platz des **3p** Orbitals.

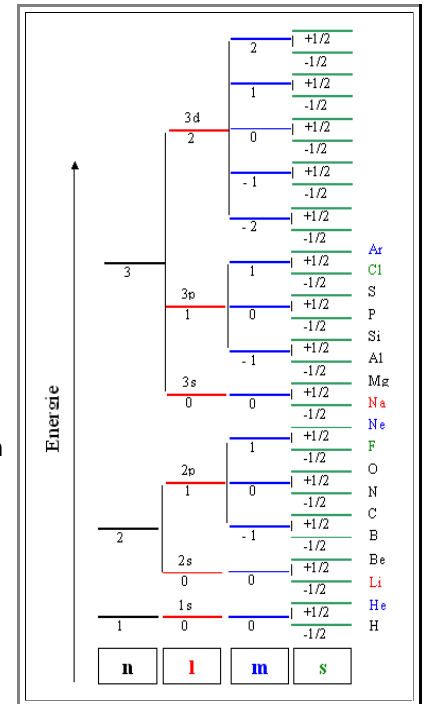
Danach stimmt die Systematik aber nicht mehr. Kalium (**K**) hat ein Elektron mehr als **Ar**, das aber nicht das erste der **3d** Niveaus besetzt, die jetzt "eigentlich" an der Reihe wären, sondern das **4s** Orbital.

Warum macht es das? Weil halt die Energie des **4s** Orbitals niedriger ist als die der **3d** Niveaus. Warum ist die Energie des **4s** Orbitals niedriger Kommt halt so aus der Schrödingergleichung raus.

Im Modul [2.1.6](#) ist das übrigens korrekt dargestellt.

Die nächste Frage, die sich jetzt aufdrängt ist: Passiert das noch öfter? Die Antwort ist: selbstverständlich. Mutter Natur nutzt jeden "Trick" in allen Varianten. Hier die Grobübersicht:

- Beim **K** (und **Ca**) werden die **4s** Zustände vor den **3d** Zuständen gefüllt.
 - Beim **Rb** und **Sr** werden die **5s** Zustände vor den **4d** Zuständen gefüllt.
 - Die **4f** und **5f** Zustände müssen sogar zwei volle Perioden bis zur Besetzung warten, d.h. die **6s** bzw. **7s** Zustände (und andere) sind schon besetzt bevor die **4f** und **5f** Zustände "dran sind". Damit werden dann die "seltenen Erden" bzw. "Actiniden" definiert.
- So langsam wird's Chemie - aber das war ja auch der Tittel von Modul **2.1.6**: Das Atom und die Chemie.



Plancksches Strahlungsgesetz

Advanced

Es ist zwar lehrreich, aber auch sehr mühsam, nachzuvollziehen wie Max **Planck** auf sein berühmtes Strahlungsgesetz kam und damit ein sichtbares Zeichen für die sich formierende Quantenmechanik setzte.

- Es ist aber ungleich einfacher, sich das Strahlungsgesetz herzuleiten, *nachdem* man ein paar der grundlegendsten Dinge der Quantentheorie verstanden hat. - z.B das "freie Elektronengas", das in der MaWi II Vorlesung ausführlich behandelt wird.
- Allerdings wird auch in MaWi II das Strahlungsgesetz nicht behandelt. Es findet sich aber im "*Semiconductor*" Hyperscript - [hier ist der Link](#) für alle die es jetzt schon wissen wollen.

Sommerfeldsche Schule

Arnold Sommerfeld wurde am **5.12.1868** in Königsberg geboren: am **26.4.51** starb er in München. **1906** übernahm er die Professur für theoretische Physik in München.

Eine [detaillierte Biographie](#) findet sich im Link

Advanced

Die junge Quantenmechanik sah Sommerfeld zunächst skeptisch, aber nach langen Diskussionen mit Einstein, ließ er sich **1910** für das Quantenkonzept überzeugen.

Das Bohrsche Modell nahm er rasch auf und baute es aus. **1918**, nur **5** Jahre nachdem Bohr sein Modell vorlegte, war die mathematische Entwicklung des dann Bohr-Sommerfeldschen Atomtheorie genannten Modells im wesentlichen beendet.

Der wesentliche Fortschritt gegenüber dem Bohrschen Modell war die (naheliegende) Erweiterung auf Ellipsenbahnen.

Der entscheidende Punkt war die Quantisierungsbedingung. Sommerfeld ersetzte die Bohrsche Bedingung des gequantelten Bahndrehimpulses durch die allgemeinere Bedingung

$$\oint p \cdot dq = n \cdot h$$

wobei **q** eine allg. Lagekoordinate und **p** die zugehörige Impulskomponente darstellt; **n** ist eine natürliche Zahl. Das Elektron ist damit nicht mehr wie bei Bohr auf eine Ebene festgelegt, es ergeben sich jetzt **drei** separate Quantenbedingungen, eine für jedes Orts- und Impulskoordinatenpaar. Außer der Hauptquantenzahl **n** wird damit noch die Nebenquantenzahl **l** und die magnetische Quantenzahl **m** definiert.

Zu jeder Hauptquantenzahl **n** gibt es jetzt als "Umlaufbahnen" Ellipsen mit verschiedener Exzentrizität - entsprechend verschiedenem Drehimpuls - die durch die Nebenquantenzahl **l** beschrieben sind. Man nennt **l** deshalb auch oft **Bahndrehimpulsquantenzahl**

Man kann in diesem Modell viele Dinge berechnen, oder zumindest qualitativ verstehen, die der simplen Bohrschen Kreisbahn nicht zugänglich waren; z.B. das Verhalten im Magnetfeld, oder die Spektren der Alkali-Atome (die dem Wasserstoff insofern ähneln, als sie nur ein äußeres Elektron haben, das im wesentlichen die Eigenschaften bestimmt).

Das Bohr-Sommerfeld Modell war zwar zunächst erfolgreich und auf Grund seiner Anschaulichkeit sehr beliebt, aber es ergaben sich zunehmend Diskrepanzen zwischen der Rechnung und den weiterführenden Experimenten. Schließlich mußte es aufgegeben werden, da es letztlich nur eine Hilfskrücke war, aber nicht der quantenmechanischen Realität entsprach.

Man könnte nun meinen, daß hier viel Arbeit geleistet wurde, die letztlich sinnlos war. Dem ist aber nicht so: Die intensive Beschäftigung mit dem Atom und den bekannten Modellen konditionierte und fokussierte letztlich die Gehirne der Mitarbeiter so stark auf das Problem, daß die "richtige" Quantentheorie erfunden werden konnte. Abgesehen vielleicht von der Rutherfordschen Schule (die einen Rekord von **x** Nobelpreisträger produzierte; **Rutherford** selbst bekam den Preis **1908**), hat die "**Sommerfeldsche Schule**" die meisten Nobelpreisträger hervorgebracht. Bei Sommerfeld hatten etwa **1/3** der deutschen theoretischen Physik Professoren ihr Handwerk gelernt, darunter

Werner **Heisenberg**

Max **von Laue**

Wolfgang **Pauli**

Peter **Debye**

Peter Paul **Ewald**

Paul **Ehrenfest**.

Andere Physiker (auch überwiegend Nobelpreisträger) besuchten sein Institut für einige Zeit während eines Forschungsaufenthalts, darunter

Hans **Bethe**

Rudolf **Peierls**

U. **Condon**

- I.I. Rabi
- Edward **Teller** (obwohl er einen Unfall hatte und gleich wieder zurück ging).

Compton Effekt

Advanced

- Der Compton Effekt , **1921** erstmal beobachtet, bezieht sich auf die Streuung von Licht an Atomen, d.h. an Materie.

 - Man dachte, das beliebig gut verstanden zu haben. In der Tat waren Theorien, beruhend auf der Wellennatur des Lichtes, auch sehr erfolgreich.
- Aber man hatte im ausgehenden **19.** und angehenden **20.** Jahrhundert auch überwiegend mit **Licht** im Wortsinn, d.h. in einem begrenzten Wellenlängenbereich experimentiert.

 - Die Streutheorien aber waren **universell**, d.h. sie galten für **alle** Wellenlängen.
 - Als man nun Experimente mit Röntgenstrahlung machte, gab es Grund zur Aufregung. Neben dem erwarteten Verhalten, fand man, daß Streuung stattfand, die es nicht geben durfte. Sie war nämlich **nur** (und dann aber sehr simpel) zu erklären, wenn man annahm, daß nicht eine **Welle** auf ein Teilchen stieß, sondern sich zwei **Teilchen** stießen.
 - Behandle das Röntgenlicht als einen Strom von Teilchen, und mit Impuls- und Energieerhaltungssatz ergibt sich sofort das Experiment!
- Sehr, sehr, bedenklich. Mit unverständenen Dingen kann man gut leben - früher oder später, so die Hoffnung, wird schon jemand eine **kanonische** (d.h. innerhalb der Dogmen liegende) Erklärung finden. Aber unverständene Effekte, die man ganz einfach und vollständig mit einer Annahme erklären kann, die einfach nicht stimmen **darf** - wir wissen schließlich, daß Licht eine Welle ist - das ist sehr bedenklich.

 - Definitiv ein Grund zu Kreuzzügen und Kriegen - falls sowas außerhalb der Naturwissenschaft passiert.

Komplementarität

Advanced

Niels **Bohr** war der Vater des "Komplementaritätsprinzips", das die Heisenbergsche Unschärferelation weiterführt.

- In Worten ausgedrückt bedeutet es, daß das Vorliegen präziser Kenntnisse oder Aussagen über einen spezifischen Aspekt eines Systems es gleichzeitig unmöglich macht, präzise Aussagen oder Kenntnisse über den **komplementären** Aspekt zu machen.

Was aber sind **komplementäre** Eigenschaften? Es sind **nicht** gegensätzliche Eigenschaften, eher so was wie die beiden Seiten einer Münze: Man kann immer nur eine sehen - aber nur beide zusammen definieren die Münze.

- In der **Heisenbergschen Unschärferelation** wie wir sie in Kapitel 2.1 kennenlernten, waren der **Impuls** und der **Ort** eines Teilchens die komplementären Größen; es galt

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

Eine weitere Formulierung der Heisenbergschen Unschärferelation ist

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

- Die komplementären Größen sind hier die **Energie E** und die **Zeit t**.
- Diese Beziehung bedeutet nicht mehr und nicht weniger, als daß der Energieerhaltungssatz (kurzzeitig) verletzt werden kann! Die Energie eines Systems kann sich für kleine Zeiten Δt , die durch obige Formel gegeben werden, kurzzeitig erhöhen; es können z.B. Teilchen(paare) **aus dem Nichts** entstehen, die aber ganz schnell wieder verschwinden müssen. Auf diesen **"virtuellen Teilchen"** beruht ein großer Teil der Elementarteilchenphysik!
- Was genau ein "Nichts" ist, und woher die Teilchen wissen, daß sie wieder verschwinden müssen, sind spannende (meta)physische Fragen.
- Steven Hawkins**, selbst Bildzeitungslesern ein Begriff ("Eine kleine Geschichte der Zeit"), hat sich physikalischen Ruhm erworben, weil er ausgerechnet hat, was genau passiert, wenn einer der Partner eines solchen virtuellen Teilchenpaares, das zufällig exakt am Rande eines **schwarzen Loches** generiert wurde, in das schwarze Loch fällt, und das verwaiste Einzelteilchen nun nicht mehr verschwinden kann!

Die Komplementarität von Impuls und Ort als eindeutig definierte mathematische Beziehung läßt sich qualitativ auch als Komplementarität zwischen Wellen und Teilchen auffassen. Innerhalb der Physik läßt sich Komplementarität exakt definieren und es gibt auch noch weitere komplementäre Paare, aber Bohr ging weiter - ins **Philosophische**.

- So war er der Meinung, daß die klassische Physik komplementär zur Quantentheorie sei - eine Sichtweise schließt die andere aus. Steven **Weinberg** berichtet in dem Buch "**Dreams of a Final Theory**", daß Bohr auf die Frage, was denn komplementär zu "**Wahrheit**" sei, nach kurzem Nachdenken erwiderte: "**Klarheit**". Das mag überraschend sein - wer hätte nicht auf "Lüge" getippt?
- Aber Komplementarität bedeutet eben nicht Gegensätzlichkeit, oder Polarität, sondern bezeichnet Eigenschaftspaare, die nicht gleichzeitig bekannt sein oder vorliegen können. Wie Weinberg weiter ausführte, wurde ihm die Bedeutung der Bohrschen Worte erst voll bewußt, als er in seinem Buch die Quantentheorie "klar" wiedergeben wollte. Auch beim Schreiben (vermutlich auch Lesen) dieser Kapitel, wird einem dieses Bohrsche Diktum wieder schmerzlich bewußt.

In der Bohrschen Tradition lassen sich auch andere, verwandte Auswirkungen dieser Art von Komplementarität zur Zeit sehr schön beobachten, z.B. im Bestreben vieler Universitäten, eine interne Bewirtschaftungssystematik ("Wie verteilt man am optimalsten das vorhandene Geld) zu erfinden, die gleichzeitig **einfach** und **gerecht** ist.

- Es erweist sich, auch wenn diese Einsicht noch nicht weit verbreitet ist, daß diese beiden Begriffe **komplementär** sind. (Auch **Einstein** hat dies schon erahnt, wenn er sagt: "Man soll alles so einfach wie möglich machen, aber nicht einfacher)."
- Nach Klaus Landfried, ehemaliger Präsident der deutschen Hochschulrektorenkonferenz, beschreiben wohl auch Begriffe wie **Profilbildung** - **Vernetzung** oder **Wettbewerb** - **Kooperation** komplementäre Größen - man kann sie nicht gleichzeitig haben, auch wenn "die Politik" das von den Hochschulen immer fordert.
- Man kann ins Gröbeln kommen. Soeben (**1998**) hat die **SPD** das neue Hochschulrahmengesetz abgelehnt, weil Studiengebühren nicht gesetzlich verboten wurden. Aber sind die Begriffe "**Umsonst**" und "**Qualität**" eventuell auch komplementär im Bohrschen Sinne? Wie ist es mit "**Ordnung**" und "**Kreativität**"?

Man muß sich aber davor hüten, eine letztlich nur mathematisch sauber zu definierende Beziehung zu sehr zu strapazieren.

- Sind, wie die "Süddeutsche" im Februar **98** fragt, die **Schulmedizin** und die **Naturheilkunde** (inkl. Homöopathie und Akupunktur) komplementäre Sichtweisen derselben Sache? Oder gar die **Evolutionstheorie** und die **Schöpfungsgeschichte**?

● Oder ist das einfach nur **Schwachsinn** im Mäntelchen der Wissenschaftlichkeit?

Auswahlregeln der Spektroskopie

Advanced

- Licht entsteht, wenn ein Elektron von einem Zustand Z , der durch einen Satz Quantenzahlen n, l, m, s charakterisiert ist auf einen energetisch tieferen Zustand Z' (mit den Quantenzahlen n', l', m', s') "springt".
- Tieferes Eindringen in die Quantentheorie zeigt, dass nicht jede mögliche Kombination der Quantenzahlen vorher und nachher erlaubt ist.
 - Es gelten die sogenannten **Auswahlregeln** für mögliche Übergänge, die nachfolgend etwas verkürzt dargestellt sind

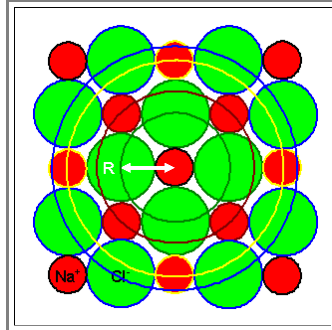
Quantenzahl	Auswahlregel
l Nebenquantenzahl (Bahndrehimpuls)	$\Delta l = l - l' = \pm 1$
m Magnetische Quantenzahl	$\Delta m = m - m' = 0, \pm 1$
s Spin-Quantenzahl	$\Delta s = s - s' = 0$

- Es gibt noch weitere Auswahlregeln für etwas komplexere Quantenzahlen (z.B. für den Gesamtdrehimpuls, der eine trickreiche Kombination von Bahndrehimpuls und Spin ist).
- Letztlich sind dann viele, wenn nicht gar die meisten Übergänge "**verboten**". Das ist gut so, denn damit wird die Spektroskopie sehr viel übersichtlicher.
 - Außerdem wird es immer spannend, wenn die Elektronen die Verbote "umgehen", denn das ist nachweisbar und führt zu Zusatzinformationen, z.B. über die Umgebung des Atoms, in dem verbotene Übergänge gelegentlich vorkommen.

Madelungkonstante

Advanced

- Wir berechnen mal die Madelungkonstante für die einfachsten Ionenkristalle, z.B. für **NaCl**. Wie dieser Kristall aussieht, kann man im [Link](#) betrachten
- Im Zentrum des Koordinatensystem sitzt also ein **Na⁺** Ion. Es hat **6 Cl⁻** Ionen als nächste Nachbarn im Abstand **$R = a/2$** ; dabei ist **a** die [Gitterkonstante](#).
- Wie das halbwegs maßstabsgetreu und zweidimensional aussieht, zeigt das folgende Bild.



- Die zweithöchsten Nachbarn sind dann **12 Na⁺** Ionen im Abstand **$2^{1/2} \cdot R$** .
 - Es folgen **8 Cl⁻** Ionen im Abstand **$3^{1/2} \cdot R$** , dann **6 Na⁺** Ionen im Abstand **$2 \cdot R$** , und so weiter und so fort.
- Die zugehörigen potentiellen Energien betrachten wir uns gleich in einer strukturierten Tabelle

Nachbartyp	Zahl	Abstand	Typ Potential	Formel
1.	6 Cl ⁻	R	anziehend	$U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 6 \cdot 2^{-1/2}$
2.	12 Na ⁺	$2^{1/2} \cdot R$	abstoßend	$U = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 12 \cdot 2^{-1/2}$
3.	8 Cl ⁻	$3^{1/2} \cdot R$	anziehend	$U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 8 \cdot 3^{-1/2}$
4.	6 Na ⁺	$4^{1/2} \cdot R$	abstoßend	$U = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot 6 \cdot 4^{-1/2}$
5.

- Damit ist die gesamte potentielle Energie

$$\begin{aligned}
 U &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \left(\frac{6}{1^{1/2}} - \frac{12}{2^{1/2}} + \frac{8}{3^{1/2}} - \frac{6}{4^{1/2}} + \dots \right) \\
 &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \alpha
 \end{aligned}$$

- Der Ausdruck in der Klammer ist die Madelungkonstante α .
- Alles, was wir noch zu tun haben ist das Bildungsgesetz der unendlichen Reihe zu finden, und dann die mathematische Aufgabe der Aufsummierung zu lösen.

● Das ist zwar nicht unbedingt einfach, aber machbar, und wir finden $\alpha = 1.7476$. Leider konvergiert die Summe nur langsam; die 4 oben gezeigten Terme ergeben z.B. erst -0.866 .

■ Für kompliziertere Kristalle wird die Berechnung der Madelungkonstanten zwar noch nicht unbedingt zur Lebensaufgabe, aber doch zu einer anspruchsvollen mathematisch-geometrischen Übung.

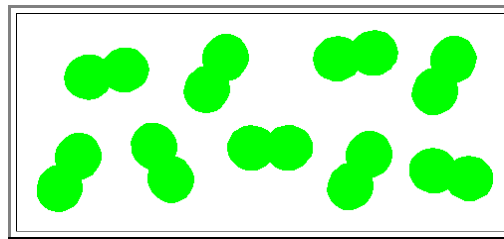
Fehlende Elektronen und Strukturbildung bei Elementverbindungen

Advanced

- Betrachten wir das [Periodensystem](#), so erkennen wir, daß die interessanten nicht-metallischen Elemente sich in 4 Klassen einteilen lassen
- Die **Halogene** (und noch Wasserstoff) mit *einem* fehlenden Elektron: **F, Cl, Br, J**.
 - Die **Chalkogene** mit *zwei* fehlende Elektronen: **O, S, Se, Te, Po**.
 - Die **Stickstoffgruppe** mit *drei* fehlenden Elektronen: **N, P, As, Sb**.
 - Und schließlich die so wichtige **Kohlenstoffgruppe** mit *vier* fehlenden Elektronen: **C, Si, Ge, Sn**.
- Das Prinzip, sich bei der Elementkristallbildung den Mangel zu teilen, erzwingt nun bei Verbindungen aus *nur einer Sorte* dieser Atome spezifische Strukturen, die kurz gestreift werden sollen.

Halogenide

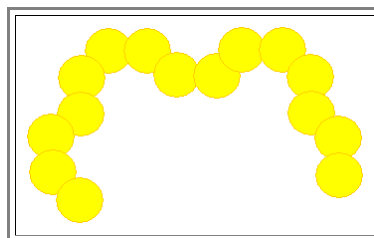
- Die Halogen-Atome brauchen genau *einen* Partner um, von einem Atom aus gesehen, volle Schalen durch Orbitalüberlapp zu erreichen. Sie werden "punktförmige", oder besser ausgedrückt, "*nulldimensionale*" Aggregate bilden - simple Moleküle wie **Cl₂**.
- Wir erwarten also, daß ein simples **Gas** aus zweiatomigen Molekülen vorliegen wird. Wir erhalten folgendes schematische Bild.



- Nur bei sehr tiefen Temperaturen werden die Moleküle sich durch [sekundäre Bindungen](#) zu Festkörpern zusammentun.

Chalkogenide

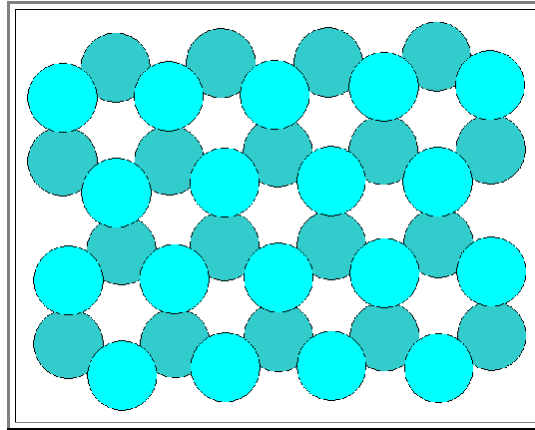
- Bei Chalkogeniden müssen sich immer *zwei* Atome an das Bezugsatom anlagern. Da jedes Atom das Bezugsatom sein kann, entsteht damit eine *Kette*; eine *eindimensionale* Struktur.
- Wer seine Chemie kennt, weiß, daß diese Kettenstruktur bei den Chalkogeniden vorliegt. Da auch zwischen den Ketten (schwache) Kräfte wirken, werden wir einen feste Körper mit niedrigem Schmelzpunkt erwarten. Da die Bindung *gerichtet ist*, wird die Kette keine willkürliche Gestalt haben, sondern vielleicht so aussehen wie unten gezeigt.
 - Da Ketten sich gegenseitig behindern erwarten wir, daß sich schon bei mittleren Temperaturen Festkörper bilden, die wohl leicht amorph zu bekommen sein werden.



Drei- und vierwertige Elemente

Das Bildungsprinzip ist nun erkennbar. Bei den Elementen mit **drei** fehlenden Elektronen müssen sich Verbindungen in der **Fläche** bilden. Wir erhalten z.B. die folgende flächige Struktur, bei der jedes Atom **drei** Bindungen zu den Nachbaratomen hat.

- Die Atome müssen dabei aber nicht alle in einer Ebene liegen.
- Ein Festkörper bildet sich, indem man die Ebenen stapelt. Das geht am besten, wenn man sie systematisch aufeinanderlegt, d.h. einen Kristall bildet.



Bei **vier** fehlenden Elektronen ist jedes Atom mit vier anderen verbunden. Wenn dabei größtmögliche Symmetrie vorliegen soll, sitzt das Bezugatom im Mittelpunkt eines **Tetraeders**.

- Da **jedes** Atom Bezugatom sein kann, erhalten wir einen definierten dreidimensionalen Körper mit ganz spezifischer Struktur, nämlich einen **Kristall** im sogenannten **Diamantgitter**.
- Und zwar **immer** - nur bei sehr hohen Temperaturen wird es gelingen, die Bindungen wieder zu lösen.
- Das wollen wir hier aber nicht weiter betrachten, sondern in **Kapitel 3.3** "[Wichtige Gitter und Kristalle](#)"

Bindungspotentiale

Bindungspotentiale gibt es in verschiedenen mathematischen Näherungen. Die hier gewählte Form

$$U_{\text{Bindg}} = - \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

ist nicht die einzig mögliche Darstellungsart. Für bestimmte Bindungstypen sind andere Formulierungen manchmal besser.

Das sogenannte **Lennard - Jones Potential** wird z.B. gerne für *van der Waals Bindungen* verwendet. Es ist nur eine Umschreibung der obigen Formel mit einem spezifischen Wert für m und lautet

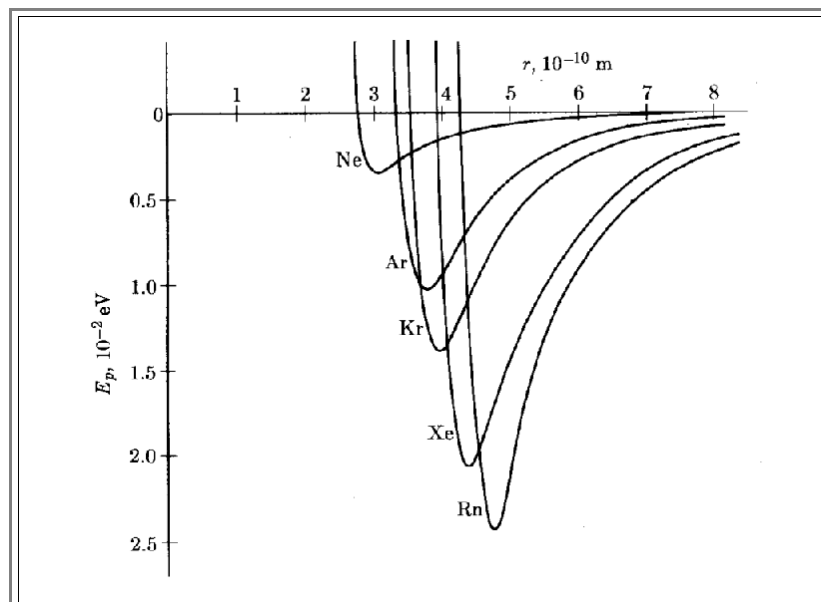
$$U_{\text{Bindg}}(r) = - 4\epsilon \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} + \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

Das Potential in dieser Form ist sehr asymmetrisch, es fällt vor dem Minimum steil ab und läuft danach recht flach aus

Einige Parameter dazu

Edelgas	r_0 (nm)	$E_{\text{Bind}}(\text{ev/Atom})$	ϵ (10^{-16} erg)	σ (nm)
He	-	-	14	0,256
Ne	0,313	0,02	50	0,274
Ar	0,376	0,08	167	0,340
Kr	0,401	0,116	225	0,365
Xe	0,435	0,17	320	0,398

Die zugehörigen Kurven sehen so aus:



Ein anderer Ansatz nennt sich **Morse - Potential**. Es lautet

$$U_{\text{Bindg}}(r) = - \left(1 - \exp -[a (r - r_0)] \right)^2$$

Es enthält direkt die physikalisch sinnvollen Variablen Gleichgewichtsabstand r_0 und Bindungsenergie E_{Bind} sowie noch einen freien Parameter a .

- Damit kann man es prinzipiell nicht ganz so gut an die gemessenen Potentiale anpassen, wie die Näherungen mit **4** freien Parametern; es ist jedoch in vielen Fällen einfacher damit zu rechnen.

1. Nebengruppe: Kupfergruppe

- Die Elemente Kupfer, Silber, Gold bilden die erste Nebengruppe des Periodensystems. Während **Cu** reativ häufig ist (und auch gelegentlich gediegen vorkam), sind **Ag** und Gold selten (und wertvoll): Mit **Cu** begann das ["technische Metallzeitalter"](#), und über die Rolle von Silber und Gold in der Geschichte braucht weiter nichts gesagt werden.
- Alle Elemente der Kupfergruppe sind weiche, leicht verformbare Metalle. Auffällig ist die "Färbung" bei **Cu** und **Au** - alle anderen Metalle sind "silbrig-metallisch". Das hat was mit der [komplexen Dielektrizitätskonstante](#) bzw. dem Brechungsindex dieser Metalle zu tun: Sie werden schon im optischen Bereich etwas durchsichtig.
- Silber ist der "beste" elektrische Leiter aller Elemente - falls man nur die [absolute spezifische Leitfähigkeit](#) betrachtet. Bei spez. Leitfähigkeit **pro kg** gewinnt jedoch **Na**.

Basics

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Kupfer <i>Copper</i>	Silber <i>Silver</i>	Gold <i>Gold</i>
Ordnungszahl	29	47	79
Atommasse [u]	63,55	107,89	196,97
Schmelzpunkt [K]	1356,6	1235,08	1337,58
Schmelzpunkt [°C]	1083,6	962,08	1064,58
Siedepunkt [K]	2868	2485	3213
Dichte [g/cm ³]	8,92	10,49	19,32
Ionisierungsenergie [eV]	7,726	7,576	9,225
Elektronegativität	1,8	1,4	1,4
Atomradius [pm]	127,8	144,4	144,2
Ionenradius [pm]	72	113	91
Oxidationszahlen	4, 3, 2, 1	3, 2, 1	5, 3, 2, 1
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	fcc -	fcc -	fcc -
Gitterkonstante [Å] (a oder c)	3,61	4,08	4,07
E - Modul [GPa]	123	79	78,7
Therm. Ausdehnungskoeff. α [10 ⁻⁶ K ⁻¹]	16,5	18,7	14,2

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
 tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
 dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
 r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

2. Nebengruppe: Zinkgruppe

- Alle Elemente der dritten Nebengruppe haben einen relativ niedrigen Schmelzpunkt - **Hg** ist das einzige bei Raumtemperatur flüssige Metall.
- Zink (**Zn**; nicht zu verwechseln mit Zinn - **Sn**) und Quecksilber waren schon in der Antike bekannt und verzinkte Metal begeben uns auf Schritt und Tritt, und auch Messing - eine **Cu - Zn** Legierung - ist von enormer Bedeutung. **Zn** ist nicht besonders giftig oder gefährlich.
- Bei **Hg** und **Cd** fällt einem natürlich sofort die Giftigkeit und Umweltgefährdung ein, das setzt ihrer heutigen Anwendung enge Grenzen. Immerhing aber sind **CdS**, **CdTe**, und weitere Verbindungen wichtige Halbleiter.

Basics

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Zink <i>Zink</i>	Cadmium <i>Cadmium</i>	Quecksilber <i>Mercury</i>
Ordnungszahl	30	48	80
rel. Atommasse [u]	65,39	112,41	200,59
Schmelzpunkt [K]	692	594	234,1
Schmelzpunkt [°C]	419	321	-38,9
Siedepunkt [K]	1181	1040	630
Dichte [g/cm ³]	7,13	8,65	13,55
Ionisierungsenergie [eV]	9,4	10,4	10,4
Elektronegativität	1,7	1,5	1,5
Atomradius [pm]	138	154	157
Ionenradius [pm]	83	103	112
Oxidationszahlen	2	1, 2	1, 2
Gittertyp Umwandlungstemp.[°C]	hcp -	hcp -	r -
Gitterkonstante [Å] (a or c)	2,66 4,95	2,97 5,61	1,57 3,0
E - Modul [GPa]	92,2	50	?
Therm. Ausdehnungskoeff. α [10 ⁻⁶ K ⁻¹]	?	?	?

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorhombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
 tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
 dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
 r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

3. Nebengruppe: Scandiumgruppe

- Die Scandiumgruppe enthält neben Scandium und Yttrium auch Lanthan und Actinium, die sozusagen als Platzhalter der [Lanthanoiden und Actiniden](#) dienen. Actinium ist radioaktiv und zwischenzeitlich "ausgestorben"; es kommt nur in noch "laufenden" Zerfallsreihen vor.
- Chemisch ähneln diese Elemente den Elementen der Borgruppe; im übrigen sind sie immer nur dreiwertig.
- Am Beispiel des Y lässt sich sehr schön zeigen, wie ein normalerweise "lieblos" behandeltes Element in der modernen Materialwissenschaft zunehmend eine Schlüsselrolle spielt.:
 - Yttriumoxid - Y_2O_3 - spielt eine große technische Rolle. Wir finden es als "Stabilisator" (besser Leerstellenquelle) im "YSZ", dem "Yttrium stabilized Zirconia", einem sehr wichtigen Material der Ionik (e.g. für Lambdasonden oder Brennstoffzellen); aber auch als "Dispersionpartikel" in Metalllegierungen um die Festigkeit zu erhöhen.
 - Der Hauptanteil des Y geht aber wohl in die "Leuchtschicht"produktion: Y ist für die rote Farbe bei Bildschirmen zuständig, in Verbindungen wie Y_2O_3 - Europium.
 - Y- "[Garnets](#)" (ein besonderer Kristalltyp) sind "High-Tech" Materialien, wichtig für Laser, Mikrowellenfilter und Magnetwerkstoffe.
 - Weiterhin wurde Y "berühmt", weil es das Schlüsselement in der sog. "1-2-3" Verbindung ($\text{YCu}_2\text{Ba}_3\text{O}_7$) ist, dem ersten Hochtemperatursupraleiter mit einer Sprungtemperatur oberhalb des Siedepunkts von flüssigem Stickstoff.

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Scandium <i>Scandium</i>	Yttrium <i>Yttrium</i>	Lanthan <i>Lanthanum</i>	Actinium <i>Actinium</i>
Ordnungszahl	21	39	57	89
rel. Atommasse [u]	44,95591	88,90585	138,9055	227,0278
Schmelzpunkt [K]	1812	1796	1193	1320
Schmelzpunkt [°C]	1539	1523	920	1047
Siedepunkt [K]	3105	3610	3727	3470
Dichte [g/cm ³]	2,99	4,47	6,16	10,07
Ionisierungsenergie [eV]	6,54	6,38	5,577	6,9
Elektronegativität	1,2	1,1	1,1	1,0
Atomradius [pm]	160,6	181	187,7	187,8
Ionenradius [pm]	83	106	122	118
Oxidationszahlen	3	3	3	3
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	hp -	hcp -	fcc 350 hcp	?
Gitterkonstante [Å] (a or c)	?	3,66 5,81	3,76 6,06	?
E - Modul [GPa]	?	?	37,5	?
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	?	?	5,8	?

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert

sc = simple cubic = kubisch-primitiv

hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)

tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

4. Nebengruppe: Titangruppe

Die 4. Nebengruppe enthält - wie alle Nebengruppen - Übergangsmetalle.

- Ti ist von einiger technischer Bedeutung, ist aber immer noch sehr teuer.
- Zr ist insofern bemerkenswert, weil es eine sehr kleinen Einfangquerschnitt für Neutronen besitzt; das macht es zu einem besonders wertvollem Werkstoff in der Kerntechnik. Zirkoniumdioxid - ZrO_2 - ist eine der wichtigsten technischen ionenleitenden Keramiken.
- Hf ist dem Zr sehr ähnlich und wird in kleinem Maßstab in der Kerntechnik eingesetzt.

Basics

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Titan <i>Titanium</i>	Zirkonium <i>Zirconium</i>	Hafnium <i>Hafnium</i>
Ordnungszahl	22	40	73
rel. Atommasse [u]	47,88	91,224	178,49
Schmelzpunkt [K]	1933	2125	2423
Schmelzpunkt [°C]	1660	1852	2150
Siedepunkt [K]	3533	4650	5673
Dichte [g/cm ³]	4,51	6,51	13,31
Ionisierungsenergie [eV]	6,82	6,84	7,0
Elektronegativität	1,3	1,2	1,2
Atomradius [pm]	144,8	160	156,4
Ionenradius [pm]	61	87	84
Oxidationszahlen	4, 3, 2	4, 3, 2, 1	4, 3, 1
Gittertyp Umwandlungstemp.[°C]	bcc 885 hcp	bcc 852 hcp	bcc 131 hcp
Gitterkonstante [Å] (a or c)	2,95 4,73	3,23 5,15	3,20 5,06
E - Modul [GPa]	106	92,2	138
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$]	10	7,2	(6,0)

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = kubisch flächenzentriert; Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = hexagonal
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorombic = orthorhombisch, monoklin, triklin
 tp = simple tetragonal = tetragonal
 dia = diamant strukture = Diamantstruktur
 r = trigonal = rhomboedrisch trigonal

5. Nebengruppe: Vanadiumgruppe

- Vanadium, Niob und Tantal sind wichtige und relativ häufig vorkommende Elemente; Hahnium ist künstlich erzeugt.
- Alle Elemente sind technisch wichtig ("Tantalkondensator), insbesondere als Legierungsbestandteile. **Nb** war (und wahrscheinlich ist) ein Hauptbestandteil von technisch eingesetzten Supraleitern.

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Vandium <i>Vandium</i>	Niob <i>Niobium</i>	Tantal <i>Tantalum</i>
Ordnungszahl	23	41	73
rel. Atommasse [u]	50,9415	92,90638	180,9479
Schmelzpunkt [K]	2163	2741	3269
Schmelzpunkt [°C]	1890	2468	2996
Siedepunkt [K]	3653	5200	5698
Dichte [g/cm ³]	6,09	8,58	16,68
Ionisierungsenergie [eV]	6,74	6,88	7,89
Elektronegativität	1,5	1,2	1,4
Atomradius [pm]	132,1	142,9	143
Ionenradius [pm]	59	69	64
Oxidationszahlen	5 bis -3	5 bis -1	5 bis -1
Gittertyp Umwandlungstemp.[°C]	bcc -	bcc -	bcc -
Gitterkonstante [Å] (a or c)	3,03	3,30	3,30
E - Modul [GPa]	127	104	175
Therm. Ausdehnungskoeff. α [·10 ⁻⁶ K ⁻¹]	7,8	7,1	3,6

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorhombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
 tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
 dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
 r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

6. Nebengruppe: Chromgruppe

Die 6. Nebengruppe enthält sehr wichtige Elemente:

- Chrom ist uns allen bekannt - "verchromte" Metallteile sind aus der Technik nicht wegzudenken. Wichtiger noch ist es als Hauptlegierungsbestandteil rostfreier Stähle. Es gibt aber noch viele andere Anwendungsgebiete; dies zeigt sich auch an der Weltproduktion im Bereich einiger Mio Tonnen.
- Mo** und **W** haben sehr hohe Schmelzpunkte - man findet diese Metalle in den Glühfäden von Glühlampen. Wichtiger aber sind sie für Legierungen aller Art.

Basics

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Chrom <i>Chromium</i>	Molybdän <i>Molbdenum</i>	Wolfram <i>Tungsten</i>
Ordnungszahl	24	42	74
rel. Atommasse [u]	51,9961	95,94	183,85
Schmelzpunkt [K]	2130	2890	3680
Schmelzpunkt [°C]	1857	2617	3407
Siedepunkt [K]	2755	5833	6200
Dichte [g/cm ³]	7,14	10,28	19,26
Ionisierungsenergie [eV]	6,766	7,099	7,98
Elektronegativität	1,6	1,3	1,4
Atomradius [pm]	124,9	136,2	137,0
Ionenradius [pm]	64	62	62
Oxidationszahlen	6 bis -2	6 bis -2	6 bis -2
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	bcc -	bcc -	bcc -
Gitterkonstante [Å] (a or c)	2,89	3,15	3,16
E - Modul [GPa]	186	301	388
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$]	?	6,5	7,0

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
sc = simple cubic = kubisch-primitiv
hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
op = simple orthorhombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

7. Nebengruppe: Mangangruppe

Nur Mangan hat einige technische Bedeutung;

- Tc muß künstlich erzeugt werden und spielt keine Rolle in der Technik, Re ist selten und nur selten verwendet

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Mangan <i>Manganese</i>	Technetium <i>Technetium</i>	Rhenium <i>Rehnum</i>
Ordnungszahl	25	43	75
rel. Atommasse [u]	54,93805	98,9063	186,207
Schmelzpunkt [K]	1517	2445	3453
Schmelzpunkt [°C]	1244	2172	3180
Siedepunkt [K]	2370	5303	5900
Dichte [g/cm ³]	7,44	11,49	21,03
Ionisierungsenergie [eV]	7,435	7,28	7,88
Elektronegativität	1,6	1,4	1,5
Atomradius [pm]	124	135,8	137,0
Ionenradius [pm]	91	56	60
Oxidationszahlen	7 bis -3	7 bis -3	7 bis -3
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	bcc 1138 fcc 1095 sc	hcp -	hcp -
Gitterkonstante [Å] (a or c)	8,89	2,74 4,39	2,76 4,46
E - Modul [GPa]	208	407	461
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	21	?	6,8

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
sc = simple cubic = kubisch-primitiv
hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

8. Nebengruppe: Eisen- und Platingruppe

Basics

Üblicherweise wird die Eisengruppe weiter unterteilt in die **eigentliche** Eisengruppe (**Fe, Co, Ni**) und die **Platingruppe** (**Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt**)

Die drei Elemente in der eigentlichen Eisengruppe sind alle wichtige Elemente, aber **Fe** **übertrifft natürlich alles**.

● Zur Bedeutung von **Fe** muß nicht viel gesagt werden; ein kurzer Blick in den Modul "[Geschichte des Stahls](#)" wird reichen.

● Auch **Co** und **Ni** sind als Legierungsbestandteile und für viele andere Anwendungen seit alters her bekannt und geschätzt.

Die Platingruppe enthält zwar relativ unwichtige Exoten (**Ru, Rh, Os, Ir**), aber auch die aus der Technik nicht wegzudenkenden Metalle **Pt** und **Pd**. Dabei steht weniger der Gebrauch in der Schmuckindustrie im Vordergrund, sondern die Verwendung in allen Arten von Katalysatoren (inkl. des Katalysators im Auto).

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Eisen <i>Iron</i>	Cobalt <i>Cobalt</i>	Nickel <i>Nickel</i>	Ruthenium <i>Ruthenium</i>	Rhodium <i>Rhodium</i>	Palladium <i>Palladium</i>	Osmium <i>Osmium</i>	Iridium <i>Iridium</i>	Platin <i>Platinum</i>
Ordnungszahl	26	27	28	44	45	46	76	77	78
rel. Atommasse [u]	55,85	58,93	58,69	101,07	102,91	106,42	190,2	192,22	195,08
Schmelzpunkt [K]	1808	1768	1726	2583	2239	1825	3318	2683	2045
Schmelzpunkt [°C]	1535	1495	1453	2310	1966	1552	3045	2410	1772
Siedepunkt [K]	3023	3143	3005	4173	4000	3413	4300	4403	4100
Dichte [g/cm³]	7,87	8,89	8,91	12,45	12,41	12,02	22,61	22,65	21,45
Ionisierungsenergie [eV]	7,87	7,86	7,64	7,37	7,46	8,34	8,7	9,1	9,0
Elektronegativität	1,6	1,7	1,8	1,4	1,5	1,4	1,5	1,6	1,4
Atomradius [pm]	124,1	125,3	124,6	134	134,5	137,6	135	135,7	138
Ionenradius [pm]	67	82	78	77	75	86	67	66	85
Oxidationszahlen	6 bis -2	5 bis -1	4 bis -1	8 bis -2	6 bis -1	4 bis 2	8 bis -2	6 bis -1	6 bis 2
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	bcc 1402 fcc 910 bcc	fcc 440 hcp	fcc	hcp	fcc	fcc	hcp	fcc	fcc ?
Gitterkonstante [Å] (a or c)	2,86	2,51 4,07	3,52	2,70 4,27	3,80	3,88	2,73 4,31	3,83	3,92
E - Modul [GPa]	213	204	202	(432)	379	113	560	528	168
Therm. Ausdehnungs- koeff. α [10 ⁻⁶ [K ⁻¹]]	14,0	12,0	12,5	9,8	8,5	11,2	?	6,6	8,94

● Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.

● fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert

sc = simple cubic = kubisch-primitiv

hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

op = simple orthorhombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)

tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

Alkali Elemente (Hauptgruppe I)

Basics

- Die **Hauptgruppe IA** umfaßt die **Alkalimetalle** und **Wasserstoff**; der aber nicht zu den Alkalimetallen gerechnet wird sondern als Einzelfall behandelt wird.
- In der Häufigkeit der Alkalimetalle steht Kalium an erster Stelle, unmittelbar gefolgt von Natrium.
 - Seltener sind Rubidium, Lithium und Cäsium, wohingegen Francium nur als Zwischenprodukt in radioaktiven Zerfallsreihen auftritt.
 - Der Anteil der Alkalimetalle an der Bildung der Erdkruste liegt bei knapp **5%**. In der Natur kommen die Elemente dieser Gruppe stets gebunden vor. Sie sind in mineralischen Vorkommen oder als gelöste Salze im Wasser der Meere zu finden.
- Die Alkalimetalle sind silbrig-glänzende, weiche Leichtmetalle; Natrium ist so weich, daß man es problemlos mit einem Messer zerteilen kann.
 - Sie haben Schmelzpunkte zwischen **180 °C** (Lithium) und **27 °C** (Francium) bzw. Siedepunkte zwischen **1317 °C** (Lithium) und **677 °C** (Francium).
 - Als Elemente sind sie kaum eingesetzt (Flüssiges **Na** wurde allerdings als Kühlmittel in Brutreaktoren erwogen). Aus Verbindungen (z.B. **NaCl**, **KNO₃** (Dünger) sind sie nicht wegzudenken.
 - Der "**Li**-Ionen-Akku" hat sich in den letzten **10** Jahren (so lange gibt es ihn) einen Markt von **DM 2 · 10⁹** erobert, etwa die Hälfte des (rapide steigenden) Gerätebatteriemarktes.
- Da die zweite Ionisierungsenergie bei den Alkalimetallen deutlich höher ist als die erste, besitzen sie in allen ihren Verbindungen die Oxidationsstufe **+1**.
 - Die Reaktivität der Alkalimetalle nimmt von Lithium zu Francium zu.
 - Alle Alkalimetalle verleihen einer Flamme charakteristische Färbungen, durch die sie in ihren Verbindungen leicht nachweisbar sind.

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Lithium <i>Lithium</i>	Natrium <i>Sodium</i>	Kalium <i>Potassium</i>	Rubidium <i>Rubidium</i>	Cäsium <i>Caesium</i>	Francium <i>Francium</i>
Ordnungszahl	3	11	19	37	55	87
Atommasse [u]	6,94	22,99	39,10	85,47	132,91	223,02
Schmelzpunkt [K]	453,69	370,95	336,8	312,2	301,55	300
Schmelzpunkt [°C]	180,69	97,95	63,8	39,2	28,55	27
Siedepunkt [K]	1590	1165	1047	961	963	950
Dichte [g/cm ³]	0,53	0,97	0,86	1,53	1,90	?
Ionisierungsenergie [eV]	5,39	5,14	4,34	4,18	3,89	4,0
Elektronegativität	1,0	1,0	0,9	0,9	0,9	0,9
Atomradius [pm]	155	153,7	227	247,5	265,5	270
Ionenradius [pm]	78	98	133	149	165	180
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	bcc ? fcc -195 hcp	bcc -237 fcc	bcc	bcc	bcc	?
Gitterkonstante [Å] (a/c) bei 20 °C	3,51	4,28 ?	5,33	5,62	2,67	?

E - Modul [GPa]	11,5	8,93	3,53	2,35	1,47	?
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	46,6	72	83	90	?	?

Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.

fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a

bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert

sc = simple cubic = kubisch-primitiv

hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)

tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

**In the beginning there was nothing.
And the Lord said: "let there be light"
and there was still nothing,
but now you could see it.**

Terry Pratchett

Basics Elementarteilchen

Elementarteilchen haben zwar in den letzten Jahren etwas von ihrer Faszination verloren (weil selbst der Durchschnitts Hardcore Physiker nur mehr eine ganz vage Vorstellung davon hat, um was es bei dem "*Higgs - Boson*" eigentlich geht, nach dem im Moment mit einem Aufwand von mehreren Milliarden gesucht wird), sind aber nach wie vor die Grundlage jeglichen Verständnisses für Materialien

Hier werden jedoch nur die wichtigsten Elementarteilchen ganz kurz behandelt. Alles was zu Stichworten wie "*Quarks*", "*Neutrinos*", "*starke und schwache Wechselwirkung*", usw. zu sagen wäre, kann in zahlreichen populärwissenschaftlichen Büchern, oft von Nobelpreisträgern geschrieben, mit großem Gewinn gelesen werden, z.B. in den Büchern von [S. Weinberg](#) oder von [Gell Mann](#).

Was sind Elementarteilchen?

- Keine ganz leicht zu beantwortende Frage, denn wenn man nur die Teilchen dazu zählt, die man nicht mehr in andere zerlegen kann, bleiben nur "**Quarks**" und ein paar andere Exoten.
- Nimmt man dagegen alles, was in Reaktionen zwischen Teilchen auftreten kann und eine irgendwie definierte eigene Identität besitzt, haben wir einen ganzen Zoo von weit über **100** "Elementarteilchen".
- Außerdem behaupten die Astrophysiker mit zunehmender Lautstärke, dass es noch weitere, bisher unbekannte Elementarteilchen geben müsse, die für die sogenannte "**Schwarze Materie**" im Universum verantwortlich sein müssten.

Wir gehen es deshalb pragmatisch an und behandeln nur die "Elementarteilchen" die für die unmittelbare Materialwissenschaft wichtig sind. Das sind im wesentlichen **Elektronen, Protonen, Neutronen, Photonen und Positronen**. Es ist wichtig, das "*Photon*", das "*Lichtteilchen*" mit zu den Elementarteilchen zu rechnen!

- Alle Elementarteilchen haben einige Eigenschaften, die unabänderlich und für sie charakteristisch sind. Für die meisten dieser Eigenschaften gelten **Erhaltungssätze**, d.h. sie müssen bei Reaktionen zwischen Elementarteilchen erhalten bleiben. Darüberhinaus können sie aber natürlich auch Eigenschaften haben, die variabel sind, z.B. kinetische Energie oder Impuls - auch für diese Eigenschaften gilt ein Erhaltungssatz *in Summe*.
- Zu den spezifischen Eigenschaften der Elementarteilchen gehören auch Eigenschaften oder "Dinge", die es in der "normalen" Physik nicht gibt, und die deshalb nicht in der Umgangssprache oder der Physiksprache des frühen 20. Jahrhunderts erklärt werden können - es gibt einfach keine Wörter dafür.
- Ein Beispiel ist der **Spin** - es ist einfach *falsch*, sich den Spin eines Elementarteilchens als den Drehimpuls eines rotierenden Kügelchens vorzustellen - wie wäre das dann beim Photon, das auch einen Spin hat? Am besten ist es, sich den Spin einfach als eine besondere Eigenschaft völlig analog zur Ladung vorzustellen - schließlich weiß auch niemand was "Ladung" mehr ist, als eine meßbare Eigenschaft von Elementarteilchen. Wir haben uns nur inzwischen an den Begriff gewöhnt, ohne dauernd versucht zu sein, ihn zu hinterfragen.

Was sind die wesentlichen Eigenschaften? Hier ist eine Liste:

- Ruhemasse**; normalerweise über $E = mc^2$ in **eV** angeben. Warum Elementarteilchen die Ruhemasse haben, die sie haben, ist eine der spannendsten Fragen der Physik (hier spielt das [oben erwähnte](#) Higgs Boson mächtig rein). Da die kinetische Energie zur Ruhemasse hinzukommt, ist ein bewegtes Teilchen u.U. deutlich schwerer als ein ruhendes.
- Ladung**; kommt immer nur vor als $\pm e$ oder **0**. Nur Exoten wie Quarks haben $\pm n \cdot e/3$ als Ladung ($n = 1$ oder 2). Warum? Niemand weiß es.
- Spin**; entweder **0** oder ein Vielfaches von $\pm 1/2$; maximal (bisher) **2** (für das "*Graviton*", das bisher nur postulierte "Quant" der Gravitation). Der Spin ist eine dimensionslose Größe.
- Familie** - alle Elementarteilchen sind entweder Mitglieder der *Leptonen*- oder *Hadronenfamilie* - oder sie sind *Photonen*. Bei Interaktionen muß die Zahl der jeweiligen Familienmitglieder erhalten bleiben (Antiteilchen zählen negativ).
- Hyperladung, Isospin, Strangeness, "Color", "Flavor"**, usw. Eine ganze Reihe von Eigenschaften, ausgedrückt in Zahlenwerten, die speziellen Gesetzen gehorchen (i.d.R. Erhaltungssätzen).

- Eine letzte wesentliche Eigenschaft, wenn man so will, ist die Tatsache, daß es jedes Teilchen in **zwei** Versionen gibt: Als "**Teilchen**" und als "**Antiteilchen**". Teilchen und Antiteilchen unterscheiden sich im Vorzeichen der meisten ihrer Eigenschaften, insbesondere der Ladung, aber nicht in allen. Auch Antiteilchen unterliegen im übrigen der Gravitation; es gibt keine negative Masse. Teilchen und Antiteilchen derselben Sorte "vernichten" sich, d.h. zerstrahlen unter Aussendung von z.B. Photonen, wenn sie sich begegnen.
- Die Existenz der Antiteilchen folgt zwangsweise aus der erweiterten Schrödingergleichung - der [Dirac Gleichung](#). Es fiel am Anfang nur schwer, diese unerwarteten Lösungen einer für ganz andere Zwecke postulierten Gleichung zu glauben.

➤ Hier eine Tabelle einiger für die Materialwissenschaft wichtiger Teilchen mit ihren Eigenschaften (**HWZ** = Halbwertszeit)

	Elektron	Positron	Proton	Neutron	Photon	Müon
Masse [MeV]	0,511	0,511	938,28	939,57	0	105,66
Ladung [e]	-e	+e	+e	0	0	-e
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1	1/2
Familie	Lepton	Lepton	Hadron	Hadron	Photon	Lepton
Isospin etc.	nein	nein	ja	ja	nein	nein
Bemerkungen	stabil	stabil, Antiteilchen zum Elektron;	stabil ?	nicht stabil HWZ = 918 s	stabil sein eigenes Antiteilchen	nicht stabil HWZ = $2,2 \cdot 10^{-6}$ s

➤ Wozu braucht man diese Teilchen in der Materialwissenschaft?

- **Elektron**, **Proton** und **Neutron** ist klar: Das sind die Bauteile **aller** Atome. Aber Elektronen brauchen wir als Einzelteilchen für vieles andere auch noch - die **Elektronik**, zum Beispiel; oder für alles das mit **Elektronenstrahlen** zu tun hat.
- **Neutronen** braucht man aber auch als Einzelteilchen, nicht nur im Atomkern. **Neutronenstrahlen** - erzeugt in Kernreaktoren oder speziellen Beschleunigern - sind aus der Festkörper- und Materialforschung nicht mehr wegzudenken. **Neutronenbeugung**, Neutronenstreuung, usw. sind feste Begriffe aus dem Arsenal moderner Analytik.
- **Photonen** sind auch klar. Ohne "**Licht**" - Radiowellen, Infrarot, sichtbares Licht, Ultraviolett und Röntgenstrahlen inklusive - sieht die Welt sehr trübe aus - [siehe oben](#).
- **Positronen**, die Antiteilchen des Elektrons, braucht man nicht nur in der Medizin für "**PET**", die **Positronen Emissions Tomographie** (was auch immer das ist), sondern auch für knallharte materialwissenschaftliche Untersuchungen zur [Diffusion](#). Wer's nicht glaubt, betätigt den [Link](#).
- Das **Müon** ist nach wie vor eines der großen Rätsel der Teilchenphysik. Es ist komplett verstanden und bekannt - es ist nichts weiter als ein zu schwer geratenes Elektron. Abgesehen von der größeren Masse (und dem "trivialen" Zerfall in ein richtiges Elektron und ein Neutrino-Antineutrino Paar), ist es völlig identisch mit dem Elektron. Aber warum? Niemand weiß es so richtig.
- Das soll uns aber nicht daran hindern, Müonen zu benutzen. Erzeugt man einen Müonenstrahl (mit Mühe und viel Geld, aber ohne große Probleme), und schießt die Müonen ins Material, ersetzen sie für kurze Zeit in einigen Atomen die Elektronen - wir haben Müonenatome. Damit ändern sich Eigenschaften meßbar, und man kann Müonen als Sonden für Dinge benutzen, die sonst nur schwer der Messung zugänglich sind.
- Der große Rest - z.B. das **Antiproton** oder **Antineutron**, alle Arten von **Mesonen**, die **Neutrinos**, **Hyperonen**, **Quarks**, usw., spielen **noch** keine Rolle in der Materialwissenschaft.
- Aber, wir wollen mal eine Vorhersage wagen: Während der aktiven Berufszeit der jetzigen (**2001**) Matwis Studierenden, wird mindestens **ein** weiteres Elementarteilchen wichtig werden.

Units and Constants

General Remarks

This is the no-nonsense module with the hard facts about units, constants and transformations from one system of units into another one (after this paragraph, that is).

No explanations, historical roots, really outdated or unusual units are given - for the [fun part](#) use the link.

Basics

First, the *basics*:

- In physics we always have two things: a *physical quantity* - e.g. the speed of something, or the strain of something under load - *and* some units to measure the quantity in question.
- The *physical quantity* is what it is - it does not depend on how *you* express it in numbers. Somebody on some other planet will for sure do it differently from you and me.
- The *number* you will give to the physical quantity is strictly a function of the units *you* chose. You might use **m/s**, oder **lightyears/s**, or **wersts/year** - that will just change the *number* for the speed of the moving object a lot, but not the speed itself. Trivial, but often forgotten.

To make life easier for everybody (at least for scientists), the choice of units was taken away from you and me, and everybody is now required to *strictly adhere* to the **international standard system**, abbreviated in any language as **SI** units.

- Well, by now you, and I, and most others scientists, do comply with the **SI** system ([which was not always the case](#)) - but the public at large does not give shit; especially in the **USA**. Tell the gas station attendant any number you like in **pascal** or **bar** for the tire pressure, and he (or she) will just look at you as if you escaped from the lunatic asylum. Its **psi** or bust! And on occasion, even engineers or scientists do *not* use **SI** units - with [disastrous consequences](#) if you have tough luck.

The question now is: how many **basic units** do we need, so we can express *everything else* in these units? And which ones do we take?

- This is one of the deeper questions of humankind. Physicists claim that we just need *one more truly* basic constant of nature - and we do not need units *at all* anymore. Velocities, for instance, can always be given using the absolutely constant speed of light (in vacuum) as the unit; your typical car speed than would be something like **0.000,001**.
- But redundancy tends to make life easier (just look at your typical Sheik and his harem), and the **SI** system gives us **7 basic units** which are independent of each other.

Basic Units

Quantity	Unit name	Symbol
Length	meter	m
Mass	kilogram	kg
Time	second	s
Electrical current	ampere	A
Thermodynamic temperature	kelvin	K
Amount of substance	mol	mol
Luminous intensity	candela	cd

- Note that in English only the names of persons (as well as of animals and fictitious characters) are written with the first letter capitalized. Therefore, all units must be written with **small letters** only. (The same holds for the chemical elements, by the way: small letters only!)

From this basic units all other **SI** units can be derived. Below are tables with the more important secondary units.

First, we look at some secondary units just invoking basic units **and** a length. While we often do use special symbols for these quantities (e.g. ρ for density), these symbols are not really necessary and thus were not pronounced immutable and sacred as, e.g., the "m" for meter or the "s" for second.

Quantity	Unit name	Symbol
Area	square meter	m^2
Volume	cubic meter	m^3
Velocity	meter per second	m/s ; ms^{-1}
Acceleration	meter per square second	m/s^2 ; ms^{-2}
Wave number	reciprocal meter	m^{-1}
Density	kilogram per cubic meter	kg/m^3
Specific volume	cubic meter per kilogram	m^3/kg
Electrical current density	ampere per square meter	A/m^2
Magnetic field strength	ampere per meter	A/m
Substance concentration	mol per cubic meter	mol/m^3
Luminance	candela per square meter	cd/m^2

Now some more involved units - including important quantities like **energy**, **voltage**, and **magnetic** things.

- They are more involved, because we usually do **not** express them in **SI** basic units - which is perfectly possible - but in **secondary** units. We will also find one case where there is **no unit** - it just cancels out.
- These units often have their own symbols for reasons that become clear if you look at the **SI** units, and these symbols should not be used for something else

Quantity	Unit name	Symbol	Conversion	
			in secondary units	in basic units
Plane angle	radian	rad		$\text{m} / \text{m} = 1$
Frequency	hertz	Hz		s^{-1}
Force	newton	N		$\text{m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$
Pressure, stress	pascal	Pa	N/m^2	$\text{m}^{-1} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$
Energy, work, quantity of heat	joule	J	$\text{N} \cdot \text{m}$	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$
Power , energy flux	watt	W	J/s	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3}$
Quantity of electricity Electric charge	coulomb	C		$\text{A} \cdot \text{s}$
Electric potential, voltage	volt	V	W/A	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}$
Capacitance	farad	F	C/V	$\text{m}^{-2} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^4 \cdot \text{A}^2$
Electric resistance	ohm	Ω	V/A	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-2}$
Conductance	siemens	S	A/V	$\text{m}^{-2} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^3 \cdot \text{A}^2$
Magnetic flux	weber	Wb	$\text{V} \cdot \text{s}$	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-1}$
Magnetic flux density	tesla	T	Wb/m^2	$\text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-1}$

Inductance	henry	H	Wb/A	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-2}$
Celsius temperature	degree celsius ("centigrade")	°C		K
Radioactivity	becquerel	Bq		1/s

- Again: By using small letters it is clear that here it's all about the unit names; capitalizing the first letter would refer to the person after which this unit was named.

✓ Mercifully, the members of the "Comité international des poids et mesures" are human (up to a point, at least). In consequence they did *not* outlaw all older units in one fell stroke, but sorted them into *three* groups:

- "Old" units which may be used together with **SI** units *without restrictions*.
- Old units which may be used *for some time* in parallel to **SI** units.
- Old units which are definitely out and *must not be used at all* any more.

✓ Some of the units in the second category are regional and you probably have never heard of them. We will not include them here. The number of outlawed units is legion, we just include the still tempting ones.

✓ Here is the first category: Some of the non-**SI** units *you still may use without restrictions* :

Unit name	Symbol	Conversion
minute	min	1 min = 60 s
hour	h	1 h = 60 min = 3600 s
day	d	1 d = 24 hr = 86400 s
angle degree angle minute angle second	° ' "	$1^\circ = (\pi/180) \text{ rad}$ $1' = (1/60)^\circ$ $1'' = (1/60)' = (1/3600)^\circ$
liter	l, L	$1 \text{ l} = 1 \text{ dm}^3 = 10^{-3} \text{ m}^3$
ton	t	$1 \text{ t} = 10^3 \text{ kg}$
electron volt	eV	$1 \text{ eV} = 1.602,176,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
atomic mass unit (amu)	u	$1 \text{ u} = 1.660,539,1 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

- What a relief!

✓ Now to the *old units you may use for some more time* to come in parallel to the **SI** units:

Unit name	Symbol	Conversion
angstrom / ångström	Å	$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm}$
ar	a	$1 \text{ a} = 100 \text{ m}^2$
hectar	ha	$1 \text{ ha} = 100 \text{ a}$
bar	bar	$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa}$
barn	b	$1 \text{ b} = 100 \text{ fm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$
curie	Ci	$1 \text{ Ci} = 3.7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$
roentgen	R	$1 \text{ R} = 2.58 \cdot 10^{-4} \text{ C/kg} = 2.58 \cdot 10^{-4} \text{ As/kg}$

- Note that the letter Å is not pronounced as the a in "far", instead, it sounds like the o in "of" (cf. en.wiktionary.org/wiki/%C3%85ngstr%C3%B6m). Germans seem to think that it has to be pronounced as a mixture of German o and a (i.e., as an a-ish variant of o), but that's wrong!

Now to the **units you must not use anymore!**. We might put them into two groups:

1. The forerunners of the **SI** units, the **cgs units**; i.e. the units based on the *centimeter*, the *gram* and the *second*.
2. The simple old fashioned no-no's.

While it may appear that the **cgs** system is practically the same as the **SI** system, *this is not so!*

- Of course, the *cm*, *g*, and *s* are essentially the same basic units as in the **SI** system, the abbreviation "**cgs**", however, does not tell you anything about the other necessary basic units in this system - and *that* is where the problems come in!
- In fact, there were *several* **cgs** systems - the *electrostatic*, the *electromagnetic*, and the *Gauss cgs* system!
- We will not unravel all the intricacies for **cgs** systems and the conversion to **SI** units here - this is done in its [own module](#) - but just give some of the more common units and their conversion.

Unit name	Symbol	Conversion
erg	erg	1 erg = 10^{-7} J
dyne	dyn	1 dyn = 10^{-5} N
poise	P	1 P = $1 \text{ dyn} \cdot \text{s} / \text{cm}^2 = 0.1 \text{ Pa} \cdot \text{s}$
gauss	Gs, G	1 G corresponds to 10^{-4} T
maxwell	Mx	1 Mx (= $1 \text{ G} \cdot \text{cm}^2$) corresponds to 10^{-8} Wb
oersted	Oe	1 Oe (= $1 \text{ dyn} / \text{Mx}$) corresponds to $(1000/4\pi) \text{ A/m}$

- The "corresponds to" instead of simply "=" is an indication that while the three quantities in question do have **SI** units that correspond to magnetic flux density, magnetic field strength, and magnetic flux, they are *not* exactly the same thing.

Finally, some still fondly remembered old units *you simply do not use anymore* :

Unit name	Symbol	Conversion
torr	Torr	1 Torr = $(101,325/760) \text{ Pa}$ $\approx 133.32 \text{ Pa}$
physical atmosphere	atm	1 atm = $101,325 \text{ Pa}$
kilopond	kp	1 kp = $9.806,65 \text{ N}$
calorie	cal	1 cal = 4.184 J
micron (micro <i>meter</i> is what you use!)	μ	1 μ = $1 \mu\text{m}$

Fundamental Constants

Fundamental constants are some numbers with units that cannot (yet) be calculated from some physical theory, but must be measured.

- This may have three possible reasons:

1. There is presently no theory, and there *never* will be a theory, that allows us to calculate fundamental constants. They have the value they have because an act [of one or more gods and/or goddesses](#), or they are purely random (i.e we just happen to live in an universe, where the value is what we measure. In some other universe, or some other corner of our universe, it will be arbitrarily different).
2. There is presently no theory, but some day there will be one. Some fundamental constants will then be calculated and then are no longer fundamental.
3. There already is a theory, or at least a general theoretical framework; we just are not yet smart enough to see the obvious or to do the numerics. Masses of elementary particles, e.g., might be "fundamental constants" that fall into this category.

Hot-shot physicists have some ideas, which constant might fall into which category. Speculations along this line are a lot of fun - but of no consequence so far. So *I* will not dwell on this. (Of course, *you* may check for yourself which one of the three possibilities you are going to embrace and thus get some idea of what kind of person you are).

Fundamental physical theories usually introduce one new fundamental constant. Mechanics (including gravitation) needs the gravity constant **G**, quantum theory has Planck's constant **h**, statistical thermodynamics introduces Boltzmann's constant **k**, the special theory of relativity (or Maxwell's theory of electromagnetism which is really part of the relativity theory) needs the speed of light **c**.

New theories sometimes "explain" old constants of nature because they can calculate them, or replace them by something more fundamental. Boltzmann's constant **k**, for example, is more fundamental than the "fundamental" gas constant **R**, because it relates its number to a fundamental unit of matter (**1 particle**) and not to an arbitrary one like **1 mol**.

How many truly fundamental constants are there? Why do they have the values they have? (Just slight deviations in the values of some constants would make carbon based life impossible; this is where the so-called "[anthropic principle](#)" comes in). Will we eventually be able, with a "Theory of Everything" (**TOE**) to calculate all natural constants?

Nobody knows. We run against the deepest physical questions at this point.

So let's just look at what we have. Since it is customary to list as natural constants some quantities that are actually computable from others, we include some of these "constants" here, too (together with the conversion formula).

Symbol and formula	Numerical value	Magnitude and unit	Remarks
Speed of light in vacuum			
c ₀ , c	2.997,924,58	10 ⁸ m·s ⁻¹	Truly fundamental
Gravitational constant			
G	6.673	10 ⁻¹¹ m ³ ·kg ⁻¹ ·s ⁻²	Truly fundamental
Planck's constant			
h	6.626,068,76	10 ⁻³⁴ J·s	Truly fundamental
	4.135,6	10 ⁻¹⁵ eV·s	
Elementary charge			
e	1.602,176,462	10 ⁻¹⁹ C	Truly fundamental ? Maybe not
Fine structure constant			
α = μ ₀ ·c·e ² /2h	7.297,352,533	10 ⁻³	Unitless, maybe more fundamental than others.
Mass of a electron at rest			
m _e	9.109,381,88	10 ⁻³¹ kg	Not truly fundamental; can be calculated in principle
	0,510 998 902	MeV	
Mass of a proton at rest			
m _p	1.672,621,58	10 ⁻²⁷ kg	Not truly fundamental, can be calculated in principle
	1.007,276,466	u	
	938.271,998(38)	MeV	
Avogadro constant			
N _A	6.022,141,99(47)	10 ²³ mol ⁻¹	Not truly fundamental any more

Faraday constant			
$F = e \cdot N_A$	96,485.3415(39)	$C \cdot mol^{-1}$	Not truly fundamental any more
Universal gas constant			
R	8.314,472(15)	$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	Not truly fundamental any more
Boltzmann constant			
$k = R/N_A$	1.380,650,3	$10^{-23} J \cdot K^{-1}$	Truly fundamental
	8.617,269	$10^{-5} eV \cdot K^{-1}$	
Magnetic permeability of vacuum			
$\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$	12.566,370,614	$10^{-7} V \cdot s \cdot A^{-1} m^{-1}$	Not truly fundamental
Electric susceptibility of vacuum			
$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	8.854,187,817	$10^{-12} A \cdot s \cdot V^{-1} m^{-1}$	Not truly fundamental
Magnetic flux quant			
$\Pi = h/2e$	2.067,833,636	$10^{-15} Wb$	Smallest possible magnetic flux Not truly fundamental

The cgs System of Units

General Remarks

Basics

- Physicists love (one of) the **cgs** systems and stubbornly keep using it - even so it is "[forbidden](#)". Take the [Barrett](#) for example, a rather recent book - you will find **cgs units**. Here we will see *why* the **cgs** system still holds a lot of attraction, and how to convert **cgs** units to **SI** units.
- As long as you just use the basic units *length*, *mass* and *time*, it really does not matter much if you work with the **m**, **kg**, **s**, i.e. in **SI units**, or with **cm**, **g** and **s** - **cgs units**.
 - Engineers at your (future) level of sophistication simply can do the conversions without having to be taught *and* without making mistakes.
- A (big) problem, however, emerges as soon as you add some basic unit for *electricity*.
 - The **SI** system chose the electrical current with the unit Ampere (**A**) - and that is all there is. Like with the meter, you now need some arbitrary, but generally accepted *reference* that defines **1 A** (and at the same time gives a recipe how it will be measured).
 - For the [meter](#), we originally picked **1/10 000 000** part of the circumference of the earth and deposited that as a **Pt-Ir** piece in Paris. Later it was replaced by something better, but the general idea is the same.
 - Likewise for the [kilogram](#) and the [second](#) - but what do we take for the Ampere?
- Well, something not all that smart (from the viewpoint of physicists and practicing engineers):
 - 1 Ampere** is the magnitude of a constant electrical current, which, if running through two infinitely long parallel wires with negligible circular cross sections kept at a distance of **1 m** in vacuum, produces a force of exactly **2 · 10⁻⁷ N** per meter of wire.
 - This definition also defines **charge** in Coulomb, by simply equating **Charge [C] = (Ampere · Time) [As]**, i.e. **1 C = 1 As**.
 - Who needs forces between wires? We rarely do. What we *do* need a lot, however, are forces between *charges*. Lets see what we get for this.
- We start from the universal relation between an electrical field **E** and the force **F** that a charge **Q** experiences in said field (with the very important corollary that the field produced by **Q** is *not* added to the field already there! Asking "why" leads into really deep water, cf. chapter 28 (Vol. II) in the [Feynman lectures](#) (perfectly understandable to undergraduates!))
 - We have **F = E · Q**, and since **F** and **Q** are already defined, this equation *defines* **E**. Enter a number for **F** and **Q** and you get a number for **E**. You also get a unit: **[E] = N/As**
 - So far we have no problem. But now we look at the force on a (point charge) **q** that results from another point charge **q'** by *first* computing the field of one of the charges and then applying the formula from above.
- Lets take a "point charge" **q** and the simple statement (from Maxwell) that the *electrical flux density* **Π** through a closed surface around a charge is proportional to the charge inside the surface. We take it as *proportional*, because the numerical value of the proportionality constant will depend on the choice of units, which we try to unravel.
 - Take a sphere with radius **r** around **q** and you have

$$\Pi = \oint E df = 4\pi r^2 \cdot |E| = \gamma \cdot q$$

- With γ = proportionality constant and **df** = incremental area element. This gives us for the numerical value of the electrical field strength at a distance **r** from a point charge **q**

$$E = \frac{\gamma \cdot q}{4\pi \cdot r^2}$$

- Now we know the field at some distance **r** from the charge, and therefore the force **F** on a charge **q'**; we have

$$F = q \cdot q' \cdot \frac{\gamma}{4\pi \cdot r^2}$$

- This is completely general, as long as we make no assumptions for γ .

OK, *now* let's discuss the possibilities for the value of γ .

- If we use **SI** units, we have *no choice*: We already have definitions for *force*, *charge* and the *electrical field* **E** in **SI** units the numerical value of γ is determined. We simply have (writing γ as $\gamma = 1/\epsilon_0$)

$$F = q \cdot q' \cdot \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2}$$

- With $\epsilon_0 = 8,859 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$ = proportionality constant between the charge **q** inside some body and the total flux Π through the surface of that body, or

$$\Pi = \oint E df = \frac{q}{\epsilon_0}$$

- Forgetting for a moment that we *must* use **SI** units, we could make life a lot easier by simply defining $\gamma := 4\pi$, and presto, we have a Coulomb law as you find it quite often in text books, that can be written most simply as

$$F = \frac{q \cdot q'}{r^2}$$

- It's easy to see why people like that - you simply save a lot of boring writing.

However, since you already have defined lengths and forces somehow (in the **cgs system** they were given in "**dyn**" (**1 dyn = 1 gm/s² = 10⁻⁵ N**)), *you are now making a statement as to how you measure charge*. The easiest thing to do is to define charge in such a way that we get a unit of force (= **1 dyn**) if two units of charge (= ???) are one unit of distance (= **1 cm**) apart.

- This means we take the numerical value of **q** and **q'** to be **q = q' = 1 [?]**, and the distance **r** to be **1 cm**.
- Your force must come out to be *one dyn*; we have **F = 1 dyn = 1 gcm/s² = 1 [?].[?]/cm²** which gives our unit of charge to be **[q]² = g · cm³/s²**, or

$$[q] = \text{g}^{1/2} \cdot \text{cm}^{3/2} \cdot \text{s}^{-1}$$

A bit strange, but who cares. You simply call it an "*electrostatic unit (esu)*" (**ESU** in German; for "elektrostatische Einheit").

- Essentially, instead of defining the unit of current (= **1 A**) by some force law, you define a *charge* by some other (but more frequently used) force law. Add it to your **cgs** basic units as the essential required input for electricity, and you have the "*electrostatic*" **cgs** system, sometimes called **CGSF** system (the "**F**" stands for "*Franklin*", [**Fr**]", which was the name given to the unit of charge); i.e. **1 Fr = 1 g^{1/2} · cm^{3/2} · s⁻¹**.
- However, nobody uses the name "*Franklin*" anymore, you just call it electrostatic unit charge, or **esu**, or whatever.
- Look at this copy from the Feynman lectures, to see how pissed people become with the **SI** convention!

There is a *physical* reason for being able to write the dipole potential in the form of Eq. (6.16). Suppose we have a point charge q at the origin. The potential at the point P at (x, y, z) is

$$\phi_0 = \frac{q}{r}.$$

(Let's leave off the $1/4\pi\epsilon_0$ while we make these arguments; we can stick it in at the end.) Now if we move the charge $+q$ up a distance Δz , the potential at P will change a little, by, say, $\Delta\phi_+$. How much is $\Delta\phi_+$? Well, it is just the amount that the potential *would* change if we were to *leave* the charge at the origin and move P *downward* by the same distance Δz (Fig. 6-5). That is,

$$\Delta\phi_+ = -\frac{\partial\phi_0}{\partial z} \Delta z,$$

where by Δz we mean the same as $d/2$. So, using $\phi = q/r$, we have that the potential from the positive charge is

$$\phi_+ = \frac{q}{r} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{q}{r} \right) \frac{d}{2}. \quad (6.17)$$

Applying the same reasoning for the potential from the negative charge, we can write

Now, and this brings in a lot of confusion, instead of a *special measure for charge* needed to make the **cgs** system "electric", you also could add something else "electrical" - and out come many *different* kinds of **cgs** unit systems.

But that is only for freaks (if you run across it and cannot avoid it - look it up in a really good handbook).

Here we will only give some "translation" table, converting quantities from one system to the other. It is more tricky than it looks like!

Conversion of charge.

We must ask ourselves: How many *esu per s* do we have to run through our wires from above to produce a force of $2 \cdot 10^{-7}$ N per meter of wire? This then must be 1 C.

Problem: What is the force between two wires running some current?

You see again, why most of us prefer the **cgs** system: We all know the Coulomb law by heart, but the force between current-carrying conductors???

OK, here is how you start: The **Lorentz law** tells us that the force \underline{F} on some charge q moving with the speed \underline{v} in a magnetic field \underline{B} is

$$\underline{F} = q \cdot \underline{v} \times \underline{B}$$

Next, the magnetic field around a wire with a current I running through it is

$$B = \frac{1}{2} \pi \epsilon_0 c^2 \cdot \frac{I}{r}$$

With c = (vacuum) speed of light.

But what is the resulting formula for the [two-wire-arrangement](#) needed for defining I ?

Interestingly enough, several standard text books on electrodynamics do *not* give you the formula directly - of course, it is no big deal to derive it yourself.

Still, it shows that the magnetic force formula is far less important than the Coulomb law. Without going into the details, let's just say that the factor for converting the charge from **cgs** to **SI** and back, is $c/10$ or $10/c$, respectively.

Here are a few conversions:

Quantity	cgs	Unit	=	SI	Unit	Conversion
Charge	1	$\text{cm}^{3/2} \cdot \text{g}^{1/2} \cdot \text{s}^{-1}$ (esu)	=	$3,3356 \cdot 10^{-10}$	A·s = C	multiply by $ c /10 = 3,3356 \cdot 10^{-10}$ $ c $ = number for vacuum speed of light in cm/s
	$2,998 \cdot 10^9$ esu	esu	=	1		
Elementary charge e	$4,8033 \cdot 10^{-10}$	esu	=	$1,602 \cdot 10^{-19}$	A·s = C	
Current I	1	$\text{cm}^{3/2} \cdot \text{g}^{1/2} \cdot \text{s}^{-2}$	=	$3,3356 \cdot 10^{-10}$	A	multiply with $c/10$

Voltage U	1	$\text{cm}^{1/2} \cdot \text{g}^{1/2} \cdot \text{s}^{-1}$	=	$2,9979 \cdot 10^2$	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1} = \text{V}$	multiply with $10^{-8} \cdot c $
-----------	---	--	---	---------------------	---	-----------------------------------

And so on. For about **15 - 20** more conversions, consult some handbook.

- The real problem, however, is not conversion. The real problem is: *The formulas are different!*
- But first let's just look at our Coulomb attraction between point charges again, and see if the formulas really work

cgs	SI
$F = q \cdot q' / r^2$	$F = q \cdot q' / 4\pi\epsilon_0 \cdot r^2$
Use [esu] for q , [cm] for r F will be in [dyn].	Use [C] for q , [m] for r F will be in [N].
Check: Calculate the force for $r = 0,1 \text{ nm} = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-10} \text{ m}$, and $q, q' = \text{elementary charge}$	
$F = \frac{(4,803 \cdot 10^{-10})^2}{1^2} [\text{esu}^2 \cdot 10^{16} \cdot \text{cm}^{-2}]$ $F = 2,307 \cdot 10^{-3} [\text{cm} \cdot \text{g}^1 \cdot \text{s}^{-2}]$ $= 2,275 \cdot 10^{-3} \text{ dyn} = 2,275 \cdot 10^{-8} \text{ N}$ $F = 2,275 \cdot 10^{-3} \text{ dyn} = 2,275 \cdot 10^{-8} \text{ N}$	$F = \frac{(1,602 \cdot 10^{-19})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \cdot 1 \cdot 10^{-20}} \left[\frac{\text{C}^2}{\text{A} \cdot \text{s} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{m}^2} \right]$ $F = \frac{2,566 \cdot 10^{-38}}{111.206 \cdot 10^{-32}} \frac{\text{A}^2 \cdot \text{s}^2}{\text{A} \cdot \text{s} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{m}^1}$ <p>Now we need $1 \text{ V} = \text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}$ and get</p> $F = 2,307 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$ <p>or</p> $F = 2,307 \cdot 10^{-8} \text{ N}$

Ok - it works well enough; just with some more numerics for the **SI** system.

- So now you know: Whenever you see some expression relating to electrical forces, energies, or the like, *without an ϵ_0 or μ_0* in it, you are dealing with **cgs** units. And now you can convert to **SI** units with ease, if they appear in some book, *right?*
- Wrong.* Take the expression for the equilibrium of forces in Bohr's model from page 19 of the "[Barrett](#)", for example. It says in equations (2-4)
 $Ze^2/r = mv^2/r$.
So it must be given in **cgs** units (no particular statement is made).
- So there should be a conversion or unit table somewhere, usually at the end of the books. And there it is, on p. 543, saying
"Electronic charge, $e = 1,60 \cdot 10^{-20} \text{ emu} = 1,60 \cdot 10^{19} \text{ C}$ "

What the are **emu's**? In cross word puzzles, emus appear as relatives of ostriches, but here it must be something else.

- Yes - an "**emu**" is the electro**magnetic** charge unit; we have the "**magnetic**" **cgs system** here, it seems.
- Now you look up your trusty handbook, (e.g. the "Physikalisches Taschenbuch" if you are a German) and find that the number given for charge, as measured in **cgs magnetic units**, is to be multiplied by **10** to get the **SI** coulombs, indeed, and that an "**emu**" is $1 \text{ cm}^{1/2} \cdot \text{g}^{1/2}$.

Great - but now pluck it into the formula, and things will be very wrong - by a factor **c²**. The formula given requires **esu's**, for **emu's**, there must be a **c²** somewhere. The "Barrett" simply got it wrong! Changing electric units [changes the formulas!](#)

In other words, just switching from **esu** or **emu** to **C** will *not* do the trick and switch the **resulting force** from **dyn** to **N** in the electric world!

- While this is quite trivial on the one hand (we could have introduced conversions for the force, too), it simply means that if you want to keep some quantities (like the force) expressed in conventional units - length, mass and time - you must change your formulas, and complete them with the required 4π , ϵ_0 (or alternatively $\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$, and possibly other adornments as well).
 - And while this conversion is always possible and not all that difficult to figure out, there is *plenty of room* for confusion and mistakes - consider the "Barrett example".
- Here is a conversion table for the formulas. Whenever you encounter one of the quantities in the middle column in some **cgs** system formula, you replace it with the expression in the right hand column to obtain the formula in the **SI** system. But *remember*. You must also use the proper units!

Quantity	cgs (Gauss or electrostatic)	SI
Speed of light in vacuum	c	$(\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$
Electrical field or potential, voltage	E { Φ , V }	$[(4\pi\epsilon_0)^{1/2}] \cdot E \{ \cdot \Phi, \cdot V \}$
Electrical flux density	D	$[(4\pi/\epsilon_0)^{1/2}] \cdot D$
Charge or current, current density, polarization	q { I , j , P }	$[1/(4\pi\epsilon_0)^{1/2}] \cdot q \{ \cdot I, \cdot j, \cdot P \}$
Magnetic induction (= magnetic flux density)	B	$[(4\pi/\mu_0)^{1/2}] \cdot B$
Magnetic field	H	$[(4\pi\mu_0)^{1/2}] \cdot H$
Magnetisation	M	$[(\mu_0/4\pi)^{1/2}] \cdot M$
Conductivity	σ	$[1/(4\pi\epsilon_0)] \cdot \sigma$
Dielectric constant	ε	ϵ/ϵ_0
Magnetic permeability	μ	μ/μ_0
Resistance or Impedance	R { Z }	$(4\pi\epsilon_0) \cdot R$ $\cdot \{Z\}$
Inductivity	L	$(4\pi\epsilon_0) \cdot L$
Capacity	C	$[1/(4\pi\epsilon_0)] \cdot C$

So here is what *you* do:

- Use SI units** - even if it gives you an ulcer and you grind your teeth a lot. It will avoid many ulcers in the future.
- If you run across equations, numbers, relations, anything where you are not sure what kind of unit system is used - *be very careful!* Often it is best to pluck in some numbers and see if what you get makes any sense. Quite often, the result is so far off anything sensible (many orders of magnitude, like a factor c^2) that it just is clear that there is a confusion of units.
- But, on occasion, it is only a factor 4π - be careful!

Isotope

Basics

- Für jedes gegebene Atom - definiert durch die Ordnungszahl **z**, die die Zahl der **Protonen** im Atomkern angibt - gibt es **Isotope**, d.h. Varianten die sich durch die **Zahl die Neutronen** im Atomkern unterscheiden. Die Links führen zum Modul "Elementarteilchen".
- Während zu jedem Atom **viele** Isotope denkbar sind (man kann selbst zu dem einem Proton des Wasserstoffatoms **1, 2, 3, 4, 5,...** viele Neutronen **gedanklich** addieren), lassen sich alle real existierenden Isotope in einer der drei folgenden Gruppen finden
- 1. Stabile Isotope.** Das sind alle Isotope zu einem gegebenen **z**, die **nicht** früher oder später zerfallen, d.h. unendlich lange (oder zumindest sehr lange) stabil sind.
 - Da bei der Erzeugung der meisten Elemente im Inneren der ersten Sonnen auch alle Isotope entstanden sind, müssen alle Elemente, die wir heute, d.h. rund und roh **10 Milliarden Jahre** nach ihrer Entstehung, auf der Erde finden, Gemische stabiler (oder extrem langlebiger) Isotope sein.
 - Cl**, zum Beispiel, mit **z = 17**, besteht etwa zur Hälfte aus den Isotopen **³⁵Cl** und **³⁷Cl**, d.h. aus Atomen mit **(35 - 17) = 18** und **(37 - 17) = 20** Neutronen. Damit ist auch gleich die Schreibweise für Isotope eingeführt. Der Rekordhalter ist **Sn** mit **10** stabilen Isotopen; insgesamt haben wir ca. **500** stabile Isotope.
 - 2. Relativ stabile, aber doch radioaktive natürliche Isotope**, die mit irgendeiner (nicht extrem kleiner) Halbwertszeit (**HWZ**) zerfallen. Dabei entsteht ein neuer Atomkern kleinerer Masse **und** "radioaktive Strahlung" - i.d.R. α - oder β -Strahlung (**He**-Kerne oder Elektronen); oft begleitet von γ -Strahlung oder (Anti)neutrinos. Aber auch Positronen oder Neutronen können emittiert werden.
 - In einigen wenigen Fällen ist die **HWZ** so groß, daß auch heute noch einige nicht zerfallene Kerne existieren, obwohl ihre Entstehung recht lange zurück liegt, z.B. beim Uran. Durch den Zerfall des **²³⁸U** mit einer **HWZ** von **4,5 · 10⁹ Jahren** entstehen ständig neue radioaktive Isotope, die wiederum zerfallen, bis schließlich als Endprodukt stabiles **²⁰⁶Pb** vorliegt.
 - Über diese Zerfallskette (und die des **²³²Th** und **²³⁷Ac**) entstehen laufend die radioaktiven Isotope, die wir heute noch finden. Ansonsten haben nur noch **K, Rb, Sm** und **Lu** Isotope, die langlebig genug sind, um ihre Entstehung vor Milliarden von Jahren überlebt zu haben.
 - Einige radioaktive Isotope entstehen aber auch heute noch auf anderem Weg - das bekannteste ist das **¹⁴C**, das in der Stratosphäre durch Beschuß von "normalem" Stickstoff entsteht, "herunterrieselt", in organische Körper eingebaut wird, und nach dem Tod des Organismus mit einer **HWZ** von **5730 Jahren** zerfällt. Damit haben organische Materialien eine Uhr eingebaut, die nach ihrem Tod anfängt zu ticken, und erst nach ca. **50 000 Jahren** soweit verstummt ist, daß man sie nicht mehr ablesen kann - die berühmte "**Radiocarbon Uhr**".
 - 3. Heute werden radioaktive Isotope in großer Zahl (ca. 1000 verschiedene) künstlich hergestellt** - entweder gezielt, weil man das Isotop für irgendeine Anwendung braucht - oder als Abfallprodukt von Kernreaktoren (und "Atom"bomben). **Anwendungen** gibt es viele, vor allem in der Medizin, aber auch in der Materialwissenschaft - wir kommen noch darauf.
- Der Vollständigkeit halber seien noch aufgeführt: Die **instabile Isotope**, die, falls man sie mit Gewalt herstellen würde, **sofort** wieder zerfallen. Die Grenze zu den radioaktiven Isotopen ist natürlich fließend.
- Ihr einziger "Nutzen" besteht im Testen von Theorien. Denn natürlich gibt es detaillierte Modelle, mit denen man berechnen kann, welche Kernkonfigurationen wie stabil sind, und was für Halbwertszeiten man für instabile Isotope finden sollte. Eine, auch für die Materialwissenschaft (in Grenzen) spannende Vorhersage ist, daß man bei **z ≈ 114** wieder auf stabile "überschwere" Elemente stoßen sollte.
 - Falls das, erstens, stimmt, und, zweitens, es irgendwann mal gelingt diese Elemente in relevanten Mengen herzustellen, hätten wir zum erstenmal komplett neue elementare Materialien zur Verfügung!

Elementare Maßeinheiten

Allgemeine Bemerkungen

Basics

Maßeinheiten (wie Vorzeichen) sind einerseits trivial, andererseits der Fluch der konkreten Ausübung einer Natur- oder Ingenieurwissenschaft. Sie scheinen einen für ihr Leben gern zur Verzweiflung zu treiben. Das liegt unter anderem auch daran, daß irgendwelche Kommissionen - so scheint es - ständig daran arbeiten, die zu verwendenden Maßeinheiten zu ändern, was dann noch zusätzliche Verwirrung stiftet.

- Wer wußte vor Tschernobyl schon was ein "**Bequerel**" war? Vorher war als Einheit "**Curie**", oder eher sogar die **milli**-Curie, gebräuchlich (und ein Millicurie ist ja irgendwie auch viel niedlicher und ungefährlicher als ein Becquerel).
- Wer kann das angloamerikanische Längenmaß "**yard**" ohne nachzuschlagen in "**meter**" umrechnen? Oder **psi**, pounds per square inch in - ja in was eigentlich?
- Am schlimmsten ist vielleicht der **Druck**: Es gab (und gibt noch): **at**, **atü**, **mm Hg-Säule**, **torr**, **bar**, **Pascal**. Ähnlich war und ist es bei Magnetfeldern.
- Die etwas ältere Generation ist deshalb mit den neuen Einheiten oft in keinsten Weise vertraut, z.B würde sie "**Pascal**" absolut nicht mit Druck verbinden, wohl aber "**atü**". Man kommt leicht ins Schleudern; es empfiehlt sich bei konkreten Rechnungen genau hinzuschauen, ob sich nicht doch der eine oder andere Fehler unbemerkt eingeschlichen hat.

Diese Seite bietet Informationen über **elementare** Einheiten inkl. der Einheiten der anglosächsischen Welt. Elementare Einheiten sind die im Volk gebräuchlichen Einheiten - im wesentlichen Längen, Flächen, Volumen, Gewicht und Druck.

- Hier gibt es noch viele Mischungen mit alten Einheiten, historische Anekdoten von Interesse, und einige Konfusion.
- Bei den nicht so elementaren Einheiten, die im Volk sowieso keiner kennt, ist die Lage einfacher. Diese Einheiten sind in einem [anderen Modul](#) abgehandelt. Dort gibt es auch Umrechnungstabellen.
- In allen elementaren Maßeinheiten stecken Geschichten (in den nicht so elementaren meist auch) - langweilige, spannende und überaus skurrile - sie werden zusammen mit kurzen geschichtlichen Erläuterung gelegentlich erzählt.

Zunächst wollen wir aber nicht vergessen: **Es gibt auch viele Größen, die keine Maßeinheit besitzen!**

- Dazu gehören **Verhältnisse**, die dann gern mit der uneigentlichen Maßeinheit **Prozent** (%) oder **decibel** (**dB**) versehen werden.
- Nummern**, z.B. die Zahl der Atome in einem Mol, oder Verunreinigungsgehalte (die dann z.B. mit der uneigentlichen Maßeinheit "**parts per million**" (**ppm**) oder "**parts per billion**" (**ppb**) versehen werden. Auch Dielektrizitätskonstanten usw. gehören dazu.
- Und zu guter Letzt noch **Größen, bei denen sich die Maßeinheiten "zufällig" herauskürzen** (z. B. die **Dehnung**, die eigentlich die Maßeinheit Länge pro Länge hat).

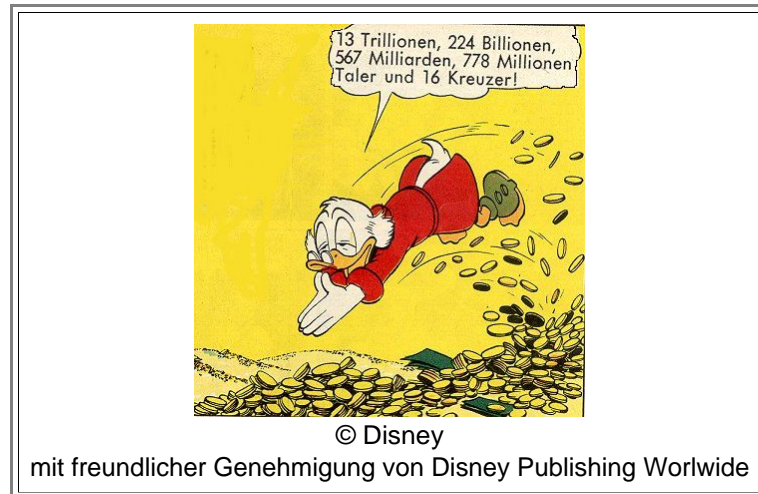
Auch die Zahlen sind nicht ganz ohne. Heutzutage könne zwar die meisten auf drei zählen - aber wie sieht es mit **Quintillionen** aus? Gibt's die? Wieviel ist es denn? Und ist eine amerikanische **Quadrillion** dasselbe wie eine deutsche?

- Schau'n mer mal

Potenz	Deutscher Name	Amerikanischer Name
10^3	Tausend	Thousand
10^6	Million	Million
10^9	Milliarde	Billion
10^{12}	Billion	Trillion
10^{15}	Billiarde	Quadrillion
10^{18}	Trillion	
10^{21}	Trilliarde	
10^{24}	Quadrillion	
10^{27}	Quadrilliarde	

10 ³⁰	Quintillion; Quinquillion	
------------------	------------------------------	--

- Daß die amerikanische billion und die deutsche Billion zu vielen Verwechslungen Anlaß geben versteht sich von selbst. Wahrscheinlich müssen wir froh sein, daß die deutsche Quadrillion und die amerikanische Quatrillion derzeit beim Staatsdefizit noch keine Rolle spielen.
- Das Problem geht im übrigen tiefer: Experten unterscheiden eine "long scale" und eine "short scale" für Zahlen. In Deutschland gilt die "long scale", in anderen Ländern, wie den USA, die "short scale". Damit es nicht zu einfach wird, haben die Länder England, Neu Seeland, Irland usw. vor einigen Jahren von der "long scale" zur "short scale" gewechselt. Ob's jeder und jede mitbekommen hat, ist aber eine andere Frage. Mehr dazu bei Wikipedia.
- Dann gibt es auch ein Beispiel für *eine* Maßeinheit, die für verschiedene Dinge verwendet wird. Die Maßeinheit "**DM**" bzw. heute "**Euro**", wird für *alles* benutzt was irgendwie mit Geld zu tun hat, auch wenn es sich um grundverschiedenen Dinge handelt. Die Betriebswirtschaft wäre für Anfänger viel einfacher zu verstehen, wenn man "Kapital", "Liquidität", "Cash flow", "Umsatz", usw. zunächst mit verschiedenen Maßeinheiten versehen würde.
- Um ein Beispiel aus neuerer Zeit zu nehmen: Die Schleswig-Holsteinische Regierung hat für spezielle Maßnahmen einen Sondertopf in Höhe von **100 Mio Euro** bereit gestellt. Das Problem ist nur, dass sie das Geld gar nicht hat, sondern dafür Schulden machen muß. Wieviel klarer wäre doch, diese Sorte Geld z.B. mit der Maßeinheit "**Noro**" zu bezeichnen. Der Haushaltsplan für das neue Jahr hätte dann zum Beispiel die Eckwerte **13 Milliarden Euro** und **2 Milliarden Noro** statt undifferenzierten **15 Milliarden Euro** - der Zugewinn an Klarheit für den **Wähler** wäre beträchtlich (allerdings für die zu Wählenden eher unerwünscht).
- Schließlich kommt es auch sehr auf die **Schreibweise** der Zahl an. Mit Zehnerpotenzen erweckt man schnell den Eindruck, daß bei großen Zahlen ungefähre Gleichheit vorliegt.
- Ob die Staatsverschuldung **\$ 10¹²** oder **\$10¹³** ist (die der Amis liegt zwischen diesen Grenzen), interessiert den normalen Menschen nicht mehr; es ist offensichtlich ungefähr gleichviel. Der Unterschied beläuft sich aber immerhin auf **9 000 Milliarden Dollar (\$ 9 000 000 000 000)**, oder **9 000 000** Schulen, die man damit bauen könnte.
- Ein Test bei amerikanischen Kongressabgeordneten hat in der Tat auch ergeben, daß die meisten keine Ahnung hatten, wie die damalige (ca. **1990**) Staatsverschuldung von ca. "**two trillion Dollars**" sich in Zahlen schreibt.
- Nur am Rande sei illustriert, daß noch in der **60er** Jahren "eine Trillion" bei Geld synonym war für "unvorstellbar viel". Wie sich die Zeiten doch geändert haben!



- Hier wurde übrigens korrekt übersetzt - Frau Erika **Fuchs** wurde nicht umsonst bereits zu Lebzeiten eine Legende.
- Aber wie ist es hiermit?: **9 Phantastilliarden 657 Zentrifugillionen Taler und 16 Kreuzer (= 9 fantasticatillions, 4 billion-jillions, centrifugalillion dollars and 16 cents)**.
- Dann gibt es natürlich noch die der Zahl vorangestellte Abkürzung für die **Zehnerpotenz**:

Potenz	Name	Zeichen		Potenz	Name	Zeichen	Als "parts per .."
10^{24}	Yotta	Y		10^{-1}	Dezi	d	
10^{21}	Zetta	Z		10^{-2}	Zenti	c	
10^{18}	Exa	E		10^{-3}	Milli	m	
10^{15}	Peta	P		10^{-6}	Mikro	μ	ppm million
10^{12}	Tera	T		10^{-9}	Nano	n	ppb billion
10^9	Giga	G		10^{-12}	Piko	p	ppt trillion
10^6	Mega	M		10^{-15}	Femto	f	ppqt quadrillion
10^3	Kilo	k		10^{-18}	Atto	a	
10^2	Hekto	h		10^{-21}	Zepto	z	
10^1	Deka	da		10^{-24}	Yocto	y	

- Wer braucht Atto, Zepto und Yocto? Oder Yotta, Zetta oder Exa? Nun ja - wer weiß. Immerhin kann man [gelegentlich darauf stoßen 2\)](#)!
- Politiker and Betriebswirte benutzen noch weitere Systeme, z.B. die Abkürzungen **Mio** und **tsd** - **2,5 Mio DM**, oder (z.B. bei Siemens) "." für **10^3** , " " für **10^6** und " " " für **10^9** .
- Damit lässt sich trefflich manipulieren; auch können Hierarchien subtil, aber eindeutig klargemacht werden.
- 13 Mio DM**, beispielsweise, ist doch irgendwie viel mehr Geld, als **20.000 tsd DM**. Ein sehr schönes Beispiel dazu aus der politischen Praxis findet sich im [Link](#).
- Im zweiten System schreibt man für **DM 50.000 000.- = 50 Mio DM = $5 \cdot 10^7$ DM = 0,05 Milliarden DM = 0,05 billion DM** bei Siemens entsprechend
 - 50 000.** - falls man zum mittleren Management gehört,
 - 50'** - falls man zum oberen Management gehört,
 - 0,05"** - falls man ein Vorstand ist, und
 - "peanuts"**¹⁾ - falls man ein Deutscher Bank Vorstand ist.

Längen und abgeleitete Größen

Längen

- Basiseinheit ist nach wie vor der [Meter \(m\)](#) mit seinen gebräuchlichen Vielfachen vom Kilometer bis zum Nano-, Femto- oder gar Attometer.
- Das angloamerikanische Gegenstück zum Meter ist der [Yard](#) und seine abgeleiteten Größen **Foot** und **Inch** bzw. das verwandte deutsche **Zoll**.
- Die Menschheit hat sich im Laufe der Zeit eine unüberschaubare Zahl von anderen Längenmaßeinheiten einfallen lassen. Wir wollen Einheiten, die (fast) nur noch historisches Interesse besitzen, wie z.B. die **Elle**, nicht weiter betrachten, sondern nur einige noch heute verwendete spezielle Einheiten.
- Da sind zunächst die Einheiten für **große** Längen. Nach dem Kilometer klafft eine große Lücke, denn als nächste Einheit kommen schon die astronomischen Einheiten.
- [Lichtjahr, Parsec und die Astronomische Einheit](#).
- Im Bereich der **kleinen Dimensionen** gibt es noch:
 - Das klassische (und noch viel verwendete) **Ångström**. Es wurde eingeführt als die natürlich Einheit für die Größe eines Atoms (und darf sogar als Ausnahme noch verwendet werden); es gilt einfach **$1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm}$** .

Flächen

- Bei der Flächenbetrachtung finden wir als Basiseinheit wieder eine Komponente des Meters, den [Quadratmeter](#) und seine Vielfachen.

- Während zwischen Meter und Kilometer eine große Lücke klafft, gibt es zwischen **Quadratmeter** und **Quadratkilometer** aber einige noch gebräuchliche (deutsche) Einheiten, die das Rechnen etwas vereinfachen, nämlich
 - Das **Ar, den Morgen und den Hektar**
 - Und natürlich auch die speziellen amerikanischen Maße, z.B. **squarefoot and acre**.

Volumen

- Die meisten Volumenmaße bauen auf Längenmaßen auf. Im metrischen System gibt es keine besonderen Probleme.
 - Wesentlich ist der Kubikmeter, der Kubikcentimeter, der Liter, der Hektoliter (= **100 l**) und der Milliliter (= **1 cm³**)
- Die angelsächsische Welt hält selbstverständlich an den **cubicfeet**, den **pints** (= **1/2 quart = 1/8 gallon = 28,875 cubic inch**) und den **gallons** fest.
 - Die Gallon (= **8 · 28.875 cubic inch = 231 cubic inch**) hat \approx **3,78 l**) - außer natürlich, wir reden über die britische "imperial" gallon, dann sind es **277,42 cubic inches**.

Zeit

- Basiseinheit ist die **Sekunde**. **Immer** - in allen Maßsystem, selbst bei den Amis, und **überall**.
 - Es ist schon etwas erstaunlich, daß sich hier eine eigentlich ziemlich blöde Maßeinheit weltweit durchgesetzt hat, die letztlich auf dem **60er** System der alten Babylonier beruht.
 - Aber seien wir froh, daß wir nicht auch hier noch auf die ganze Umrechnungsproblematik stoßen.

Masse und Gewicht

- Basiseinheit im Bereich der **Masse** bzw. des ist das **Kilogramm (kg)** und die davon abgeleiteten Größen. Dass man Kilogramm auch für **Gewichte** angibt, d.h. statt "Masse" das Wort "Gewicht" verwendet, ist im Prinzip falsch, aber weit verbreitet
 - Das **Gramm g = 10⁻³ kg** und die **Tonne (to) = 1000 kg** - niemand sagt jemals Megagramm [3\)](#).
 - Ein **kg** ist immer noch die Masse des internationalen Kilogramm Prototyps, der in Paris aufbewahrt wird (siehe Bild). Es ist der einzige Prototyp der Basiseinheiten, der noch im Gebrauch ist; der **Meter Prototyp** zum Beispiel, ist längst durch etwas Komplizierteres ersetzt worden.
 - Außerdem sind noch gelegentlich die altmodischen metrischen Einheiten **Pfund (500 g)**, **Zentner (= 100 Pfund = 50 kg)** im Gebrauch.
- Das Gramm bzw. das Kilogramm legt auch die Grundlage für die folgenden Einheiten, die aber nicht unbedingt im Haushalt vorkommen.
 - Atomare Masseneinheit** Einheitenzeichen **u**, in der Biologie/Medizin aber oft als **"Dalton"** bezeichnet. Die atomare Masseneinheit ist der **12. Teil** der Masse eines Atoms des Nuklids **¹²C** und damit gilt **1 u = 1,6605402 · 10⁻²⁷ kg**.
 - (Metrisches) **Karat** Einheitenzeichen **Kt** oder **ct**; gesetzliche Einheit zur Angabe der Masse von Edelsteinen: **1 Kt = 0,2g**.
- Es ist erübrigt sich festzuhalten, daß die Amis und Engländer - usw.
 - Wichtig sind **"Ounce"** und **"Pound"**. Ein "ounce" ist entweder der zwölfte Teil des "pounds troy", das wiederum **5 760 "grains"** hat, oder der **16. Teil** des "pounds avoirdupois"; es ist also völlig transparent und einfach.
 - Zur Umrechnung: Eher gebräuchlich sind die "Avoirdupois" Einheiten, wir haben
 - 1 ounce = 1 oz = 28 g**
 - 1 pound = 1 lb = 450 g**



Kraft, Druck und mechanische Spannung

Kraft

Im wesentlichen gibt es für alle vorkommenden Kräfte heute nur eine einzige Einheit, das **Newton N**.

- **1N = 1 kgm/s²**
- Ältere Einheiten sind praktisch verschwunden; ein bißchen lebt noch das **Kilopond (kp)** als die praktische Einheit basierend auf dem **Pond**.
1kp = 1000p = 9,80665N
 gleich der Gewichtskraft die auf eine Masse von **1kg** wirkt bei der Normalfallbeschleunigung **9.80665 m/s²**.
- Im Englischen entspricht/spricht dem Kilopond das "kilogram-force", abgekürzt **kgf**. Auch gibt es noch das "**poundal**", das ist die Kraft die ein **1 lb** Objekt mit **1 ft/sec²** beschleunigt. Da aber Krafteinheiten im täglichen Leben kaum vorkommen, und auch englischen Wissenschaftler und Ingenieure sich das Leben nicht **immer** unnötig erschweren, wird es kaum gebraucht.

Druck

Zu diesem Bereich zählen nicht nur der Luftdruck (Atmosphäre), sondern auch z.B. der zwischen Körpern herrschende Druck oder der Wasserdruck.

- Das Wort "**Druck**" wird aber überwiegend dann gebraucht, wenn **allseitig konstanter Druck** gemeint ist.
- Der Druck, der nur auf eine bestimmte Fläche wirkt, heißt besser "(mechanische) Spannung", oder, da man aus dem Kontext immer weiß, ob **mechanische** oder **elektrische** Spannung gemeint ist, einfach "**Spannung**". Spannungen werden noch in Druck- und Zugspannungen unterschieden, je nachdem ob man beispielsweise auf die Querschnittsfläche eines Zylinders drückt oder daran zieht.
- Die **SI** Einheit für Drücke und mechanische Spannungen ist das **Pascal**.
- **1 Pascal = 1Pa = 1N/m²**
- Das Pascal ist keine sehr nützliche Druckeinheit. In der Materialwissenschaft ist man z.B. sehr schnell bei **GPa** ("Giga Pascals") für "normale" Drücke oder mechanische Spannungen.
- Alte Einheiten, im "Volk" immer noch lebendig, waren das **Bar**, die Nachfolgeeinheit von **Torr**, die **physikalische (atm)** und **technische (at)** **Atmosphäre**, die **mm Hg-Säule** und das **Atü**. Es gilt

- **1 bar = 10⁵ Pa**
1 torr = 1,333224 mbar = 133,3224 Pa; 1Pa = 0,0075 torr.
1atm = 101325 Pa = 760 Torr = 1,01325 bar. Das ist die **physikalische** Atmosphäre, sie entspricht dem mittleren Luftdruck auf Meereshöhe.
1at = 1kp/cm² = 98066,5 Pa = 0,980665 bar. Das ist die **technische** Atmosphäre.
 Das **Atü** ist jetzt einfach eine technische Atmosphäre **Überdruck**, und für die **mm Quecksilbersäule (mmHg)**, die in der Medizin beim Blutdruck noch verwendet wird, gilt
1 mmHg = 133,322 Pa = 1,33322 mbar. **1 mmHg** entspricht dem Druck einer **1mm** hohen Quecksilbersäule bei Normfallbeschleunigung (**9,80665 m/s²**)
- Alles klar? Ja? - dann noch schnell die anglosächsischen Einheiten. Einfach - wir haben immer das **psi**, das "**pound per square inch**". Umrechnung bitte selber machen!

1) Aus dem Internet zum Suchwort "peanuts+Deutsche+Bank"

"Peanuts" und das ganze große Geld; Hilmar Kopper im Porträt: Als einer der wichtigsten Banker Deutschlands hat er das ganz große Geld bewegt. Und dennoch ist Hilmar Kopper vor allem wegen "Peanuts" bekannt. Jene inzwischen legendäre Äußerung, bei einem 50-Millionen-Mark-Verlust im Zusammenhang mit der Pleite des Baulöwens Jürgen Schneider handele es sich um "Peanuts", um Kleinkram eben, wurde sogar zum Unwort des Jahres 1994.

2) Aus dem "Semiconductor International" Nov. 2002

We've been living in the world of "micro" electronics for more than three decades, where the size of features on a chip is measured in micrometers. Two decades ago, we entered the "nano"-second regime, where clock periods are measured in billionths of a second. Recently we entered the "pico"-second regime, where the bit period of an OC-768 signal is measured with just 25 psec.

To describe what is sensed by the highest-volume microelectromechanical system (MEMS) component currently in production, we need to jump nine orders of magnitude smaller to units of zeptofarads. (For those interested, in decreasing order, it is micro, nano, pico, femto, atto, zepto and yocto.)

Was heißt das? MEMS = mikroelektronisch-mechanische Systeme, messen z.B. Beschleunigungen (als Airbagsensor), indem sie die Kapazität eines Kondensators mit einer beweglichen "Platte" registrieren. Und dabei kommt es eben auf

Zeptofarad an!




3) Niemand sagt Megagramm - dachte ich. Stimmt nicht; hier der Hinweis von Michael Michel vom "Controlling der Stadt Oldenburg:

Auf Ihrer Seite http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1_ge/kap_2/basics/b2_1_3.html behaupten Sie, Niemand sage "Megagramm". Irrtum! Recherchieren Sie doch einmal im Internet nach Mengenangaben zu Siedlungsabfällen. Im Abfallwirtschaftssdeutsch scheint der Begriff "Megagramm" gang und gäbe zu sein. Auf der Suche nach einer Erklärung hierfür bin ich auf Ihrer Seite gelandet, allerdings ohne Erfolg.

Ein schneller Check ergibt: Herr Michel hat recht!

Also: **1 Megagramm = 1 Mg = 10^6 g = 1000 kg = 1 to**

Periodensystem

-  Diese Seite ist der Ausgangspunkt für detaillierte Darstellungen des Periodensystems. Da die normale Bildschirmgröße zu klein ist, um alle Informationen in der üblichen Darstellungsart des Periodensystems zu fassen, lassen sich durch Anklicken weitere Ebenen geordnet nach den **Haupt-** und **Nebengruppen** darstellen.
-  Die Hauptgruppen sind dabei die mit römischen Buchstaben und "A" gekennzeichneten Elemente in einer Spalte des Periodensystems; die Nebengruppen sind mit "B" markiert.
-  Durch Anklicken der Gruppennummer oder eines Elementes lassen sich zahlreiche Daten für die betreffende Gruppe aufrufen

Basics

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIIIB	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII		
H															He		
Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	J	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															

Lanthanoiden und Actiniden

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw

Rechnen mit komplexen Zahlen

Einführung

Basics

- In der **klassischen Physik**, aber auch in der Elektrotechnik oder Materialwissenschaft, wird oft mit **komplexen Zahlen** gerechnet, obwohl alle berechneten (und letztlich auch immer meßbaren) Größen immer **reell** sind.
 - Es gibt in der **klassischen Physik** keine **imaginären** Energien, Orte, Zeiten, Spannungen, Ströme usw.! Die Einführung komplexer Größen dient **nur** der Bequemlichkeit beim Rechnen. Im Endergebnis treten nur reelle Zahlen auf - im Zweifel nimmt man vom Ergebnis nur den Realteil oder den Imaginärteil.
- **In der Quantenmechanik ist das anders.** Die konventionellen **meßbaren Größen**, die zwar letztlich immer als Endergebnis erscheinen, sind zwar auch **immer reell**, aber die **Wellenfunktion** selbst, manchmal auch die **Zeit**, ist oft eine **intrinsisch komplexe Zahl**.
 - Das ist schwer zu akzeptieren, aber das waren die irrationalen Zahlen auch. **Pythagoras** ließ einen seiner Schüler, der behauptete, daß es irrationale Zahlen **wirklich** gäbe, sogar hinrichten (heute ist es viel ungefährlicher, seinem Professor zu widersprechen).
- Obwohl komplexe Zahlen oft mit dem berühmten Mathematiker **Gauss** assoziiert werden, ist ihre Geschichte etwas älter. Insbesondere war Gerolamo **Cardano** von großer Bedeutung. Er ist heute fast schon vergessen, seine Biographie aber ist so interessant, daß es sich lohnt sie kurz darzustellen.
- Diese Seite wird die wesentlichsten Grundlagen der komplexen Zahlen und ihre Nützlichkeit bei einigen Fragestellungen der klassischen Physik wiederholen. Die wichtigsten Stichworte dazu sind
 - **Definition und Eigenschaften komplexer Zahlen; Gaußsche Zahlenebene.**
 - **Eulersche Beziehung.**
 - **Einfache Beispiele zur Nützlichkeit der komplexen Zahlen.**
 - **Ausblick auf komplexe Funktionen.**
- Weiterführende Informationen finden Sie auch in einem reinen [Mathematik-Skript](#)

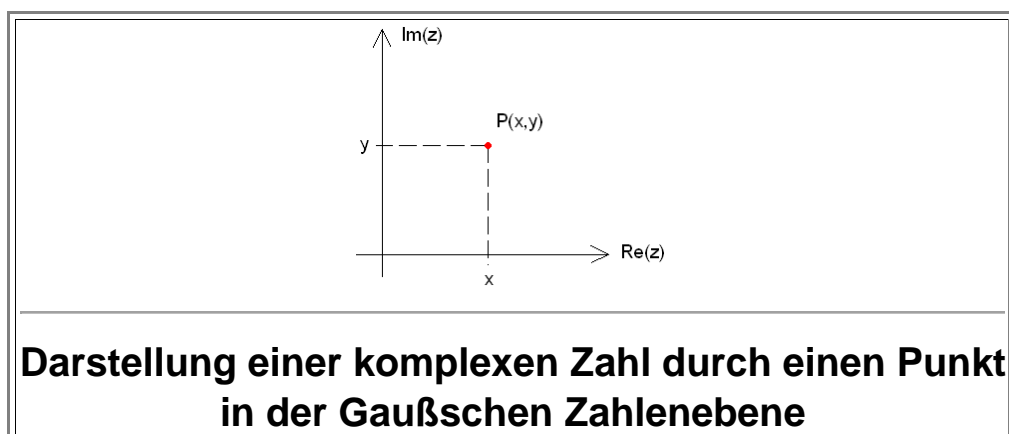
Definition und Eigenschaften komplexer Zahlen

Real- und Imaginärteil

- Komplexe Zahlen sind Zahlen der Form $z = x + iy$ wobei x und y reelle Zahlen sind. Die komplexen Zahlen stellen eine Erweiterung der reellen Zahlenmenge dar.
- Die imaginäre Einheit i genügt der Gleichung $i^2 = -1$. Daher gilt für die imaginäre Einheit $i = (-1)^{1/2}$.
- Ist $z = x + iy$, so ist $\text{Re}(z) = x$ der **Realteil** und $\text{Im}(z) = y$ der **Imaginärteil** der komplexen Zahl z .
- **Achtung:** Nicht iy ist der Imaginärteil der komplexen Zahl z , sondern nur die **reelle** Zahl y .

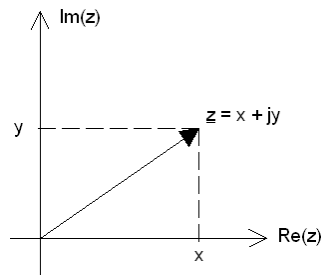
Zahlenebene

- Eine komplexe Zahl $z = x + iy$ läßt sich in der **Gaußschen Zahlenebene** durch einen Punkt **P** darstellen. Hierzu faßt man den Real- und den Imaginärteil der komplexen Zahl $z = x + iy$ als **kartesische Koordinaten** des Punktes **P** in der x, y -Ebene auf.



- In den Anwendungen werden komplexe Zahlen meist durch sog. **Zeiger** dargestellt. Dabei handelt es sich um einen **Pfeil**, der vom Ursprung des Koordinatensystems zum Bildpunkt **P(z)** gerichtet ist.

- **Zeiger** werden oft durch Unterstreichen gekennzeichnet: $\underline{z} = x + jy$. Das führt aber zur Verwechslungsgefahr mit Vektoren, die zumindest in HTML auch durch unterstreichen dargestellt werden - und Zeiger sind zwar Pfeile, aber keine Vektoren!



Darstellung einer komplexen Zahl durch einen *Zeiger* in der Gaußschen Zahlenebene.

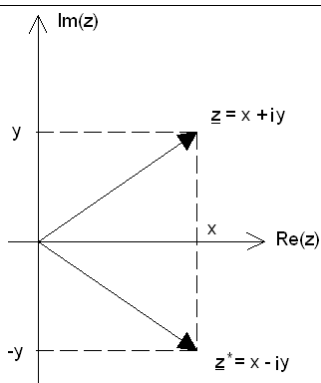
Hier ist zur Abwechslung mal das in der Elektrotechnik gebräuchliche Symbol *j* für die imaginäre Einheit gezeigt.

- **Achtung:** Der Zeiger \underline{z} ist eine geometrische Darstellung der komplexen Zahl z und nicht mit einem *Vektor* zu verwechseln!

Konjugiert komplexe Zahlen; Betrag oder Modulus

- Die komplexe Zahl $z^* = x - jy$ ist die zu $z = x + jy$ *konjugiert* komplexe Zahl.
- Die zu einer komplexen Zahl konjugiert komplexe Zahl erhält man durch einen *Vorzeichenwechsel im Imaginärteil* von z , während der Realteil unverändert bleibt:
- $\text{Re}(z^*) = \text{Re}(z)$ und $\text{Im}(z^*) = -\text{Im}(z)$

- Die Entstehung der konjugiert komplexen Zahl z^* lässt sich in der Gaußschen Zahlenebene durch *Spiegelung* der komplexen Zahl z an der reellen Achse veranschaulichen.



Komplexe Zahl und die zu ihr konjugiert komplexe Zahl in der Gaußschen Zahlenebene

- Unter dem **Betrag** $|z|$ der komplexen Zahl $z = x + jy$ versteht man die *Länge des zugehörigen Zeigers* in der Gaußschen Zahlenebene:

$$|z| = \left(x^2 + y^2 \right)^{1/2}$$

- Statt *Betrag* sagt man auch *Absolutbetrag* oder *Modul*.

Eulersche Beziehung

Die Eulersche Beziehung ist eine der wichtigsten und merkwürdigsten Gleichungen der Mathematik. Sie verkoppelt 5 der wichtigsten Zahlen die es gibt, nämlich **0**, **1**, **i**, π und **e**! Mehr darüber findet sich in spannender Form in den [Feynman Lectures](#). Wir brauchen sie für alternative Darstellungen komplexer Zahlen.

- Die Form $z = x + iy$ bezeichnet man als **Gaußsche** oder **kartesische Darstellung** einer komplexen Zahl. Daneben existieren noch zwei weitere Darstellungsformen: die **trigonometrische Form** und die **Eulersche Form**.
- In der **trigonometrischen Form** wird eine komplexe Zahl über ihre **Polarkoordinaten** r und φ festgelegt:

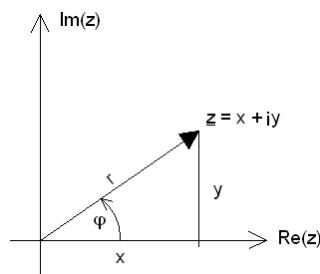
$$z = r \cdot (\cos\varphi + i \sin\varphi)$$

- Mit $r \in [0, \infty]$, $\varphi \in [\pi, -\pi]$
- Hierbei gilt:

$$r = \text{Betrag von } z$$

$$\varphi = \text{Argument, Winkel oder Phase von } z$$

Mit Hilfe der Transformationsgleichungen $x = r \cdot \cos\varphi$ und $y = r \cdot \sin\varphi$ kann man eine komplexe Zahl aus der kartesischen Form in die trigonometrische Form überführen.



Veranschaulichung der trigonometrischen Form einer komplexen Zahl

- Der Übergang von der komplexen Zahl z zu der konjugiert komplexen Zahl z^* entspricht in der trigonometrischen Darstellung einem Vorzeichenwechsel im Argument φ während der Betrag der komplexen Zahl konstant bleibt:

$$z = r \cdot (\cos\varphi + i \cdot \sin\varphi)$$

$$z^* = r \cdot (\cos -\varphi + i \cdot \sin -\varphi)$$

$$= r \cdot (\cos\varphi - i \cdot \sin\varphi)$$

- Verwendet man die von **Euler** stammende Formel

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i \sin\varphi$$

- so erhält man aus der trigonometrischen Form die **Eulersche Form einer komplexen Zahl**:

$$z = r \cdot e^{i \cdot \varphi}$$

- Diese Schreibweise einer komplexen Zahl ist besonders vorteilhaft beim Ausführen von Multiplikationen und Divisionen.
- Die zu $z = r \cdot e^{i\varphi}$ gehörende konjugiert komplexe Zahl z^* lautet in Eulerscher Form

$$z^* = [r \cdot e^{i\varphi}]^* = r \cdot e^{-i\varphi}$$

Rechnen mit komplexen Zahlen

Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division

von komplexen Zahlen in verschiedenen Darstellungsformen:

Addition und Subtraktion komplexer Zahlen in kartesischer Form:

- Komplexe Zahlen können *nur* in kartesischer Form addiert/subtrahiert werden. Dies geschieht indem man ihre Realteile addiert/subtrahiert *und* ihre Imaginärteile addiert/subtrahiert.

$$z_1 + z_2 = (x_1 + iy_1) + (x_2 + iy_2) = (x_1 + x_2) + i \cdot (y_1 + y_2)$$

$$z_1 - z_2 = (x_1 + iy_1) - (x_2 + iy_2) = (x_1 - x_2) + i \cdot (y_1 - y_2)$$

Multiplikation, Division und Potenzen komplexer Zahlen

Multiplikation in *kartesischer Form*

- Es gelten die üblichen Multiplikationsregeln für Klammerausdrücke; danach muß nach Real- und Imaginärteil sortiert werden:

$$z_1 \cdot z_2 = (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1)$$

Multiplikation in *trigonometrischer Form*

- Für die Ausführung von Multiplikationen erweist sich die trigonometrische Form oft als vorteilhafter als die kartesische Form. Die sture Durchmultiplikation ergibt zunächst

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= r_1 \cdot (\cos\varphi_1 + i \sin\varphi_1) \cdot r_2 \cdot (\cos\varphi_2 + i \sin\varphi_2) \\ &= (r_1 \cdot r_2) \cdot [(\cos(\varphi_1 + \varphi_2) + i \cdot \sin(\varphi_1 + \varphi_2))] \end{aligned}$$

- Dies läßt sich zusammenfassen zu einem klaren Bildungsgesetz :

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= z = r_1 \cdot e^{i\varphi_1} \cdot r_2 \cdot e^{i\varphi_2} \\ &= (r_1 \cdot r_2) \cdot e^{i \cdot (\varphi_1 + \varphi_2)} \end{aligned}$$

Division komplexer Zahlen in *kartesischer Form*: Mühsam, aber klar.

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{x_1 + iy_1}{x_2 + iy_2} = \frac{x_1x_2 + y_1y_2}{x_2^2 + y_2^2} + \frac{i \cdot (x_2 \cdot y_1 - x_1 \cdot y_2)}{x_2^2 + y_2^2}$$

- Division* komplexer Zahlen in *trigonometrischer Form* ist einfach und elegant.

$$\begin{aligned} \frac{z_1}{z_2} &= \frac{r_1 \cdot (\cos\varphi_1 + i \sin\varphi_1)}{r_2 \cdot (\cos\varphi_2 + i \sin\varphi_2)} = \frac{r_1}{r_2} \cdot [(\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + i \cdot \sin(\varphi_1 - \varphi_2))] \\ &= \frac{r_1 \cdot e^{i\varphi_1}}{r_2 \cdot e^{i\varphi_2}} = \frac{r_1}{r_2} \cdot e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} \end{aligned}$$

Potenzen und Wurzeln einer komplexen Zahl.

- Wendet man die Potenzgesetze auf $z = r \cdot e^{i\varphi}$ an, so erhält man die **Moivre-Formel**, welche angibt, wie man die **n-te** Potenz einer komplexen Zahl berechnet:

$$z^n = r^n \cdot e^{i n \cdot \varphi} = r^n \cdot (\cos n \cdot \varphi + i \sin n \cdot \varphi)$$

- Aus der Moivre-Formel lässt sich außerdem eine Formel zum Berechnen der **n-ten Wurzel** einer komplexen Zahl herleiten. z hat genau n verschiedene **n-te** Wurzeln w_0 bis w_{n-1} , die folgender Gleichung genügen

$$w_k = r^{1/n} \cdot \left(\cos \frac{\varphi + 2k\pi}{n} + i \cdot \sin \frac{\varphi + 2k\pi}{n} \right)$$

$$k = 0 \dots n - 1$$

Natürlicher Logarithmus einer komplexen Zahl.

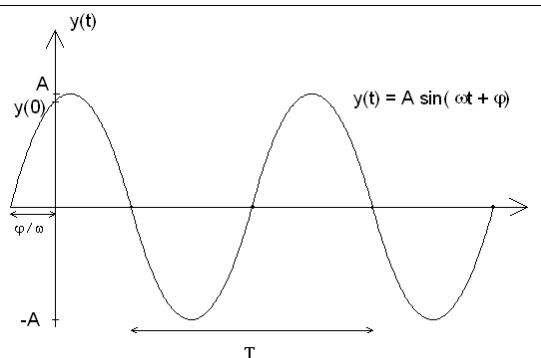
- Um den natürlichen Logarithmus einer komplexen Zahl berechnen zu können, ist es von Vorteil von der (erweiterten) Exponentialform $z = r \cdot e^{i \cdot (\varphi + 2k \cdot \pi)}$ der komplexen Zahl auszugehen, also eine "Phase" einzubauen. Daraus folgt

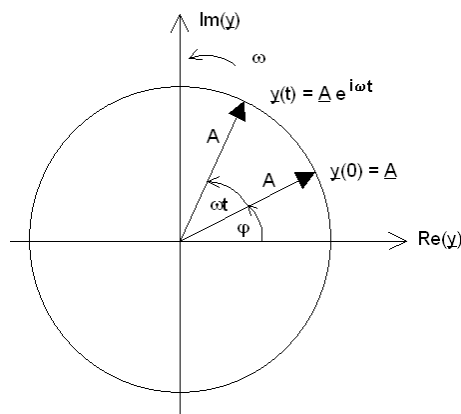
$$\begin{aligned} \ln z &= \ln [r \cdot e^{i(\varphi + 2k \cdot \pi)}] \\ &= \ln r + \ln e^{i(\varphi + 2k \cdot \pi)} \\ &= \ln r + i \cdot (\varphi + 2k \cdot \pi) \end{aligned}$$

Beispiele zur Nützlichkeit komplexer Zahlen

Zunächst brauchen wir die **Darstellung sinusförmiger Schwingungen mit Hilfe komplexer Zeiger**

- $y(t) = A \cdot \sin(\omega t + \varphi)$ beschreibt eine sich mit der Zeit sinusförmig verändernde Größe (Schwingung).
- Dabei ist A ist die Schwingungsamplitude, $\omega = 2\pi f$ die Kreisfrequenz und φ die Phase oder der Nullphasenwinkel.
- Die harmonische Schwingung $y(t)$ lässt sich durch einen komplexen Zeiger in der Gaußschen Zahlenebene darstellen. Der komplexe Zeiger besitzt die Länge A und rotiert im mathematisch positiven Drehsinn mit der Winkelgeschwindigkeit ω um den Ursprung des Koordinatensystems.





Darstellung eines harmonischen Schwingers durch einen rotierenden Zeiger

- Zum Zeitpunkt $t = 0$ schließt der Zeiger \underline{y} mit der Bezugsachse (positive reelle Achse) den Nullphasenwinkel φ ein.
- In der Zeit t überstreicht der Zeiger den Winkel ωt . Die Lage des Winkels in der Gaußschen Zahlenebene läßt sich durch die zeitabhängige komplexe Zahl darstellen:

$$\begin{aligned} y &= A \cdot [\cos(\omega t + \varphi) + i \cdot \sin(\omega t + \varphi)] \\ &= A \cdot e^{i\varphi} \cdot e^{i\omega t} \\ &= \underline{A} \cdot e^{i\omega t} \end{aligned}$$

- Dabei ist

$\underline{A} = A \cdot e^{i\varphi}$	komplexe Amplitude (zeitunabhängig)
$e^{i\omega t}$	Zeitfunktion

- Die komplexe Amplitude \underline{A} ist zeitunabhängig; sie hat den Betrag $|\underline{A}| = A$ und den Phasenwinkel φ , welcher den Anfangswinkel des Zeigers festlegt.
- Die Zeitfunktion $e^{i\omega t}$ beschreibt die Rotation des Zeigers mit der Winkelgeschwindigkeit ω .
- Der Imaginärteil des rotierenden Zeigers \underline{y} entspricht dem **Momentanwert** der Sinusschwingung $y(t)$ und damit der Projektion des Zeigers auf die Imaginärachse zum Zeitpunkt t .

$$y(t) = \text{Im}[\underline{A} \cdot e^{i\omega t}] = A \cdot \sin(\omega t + \varphi)$$

Die **Überlagerung zweier gleichfrequenter Sinusschwingungen in komplexer Darstellung** zeigt nun wie praktisch diese Betrachtungsweise ist:

- Gegeben sind zwei Schwingungen gleicher Frequenz aber verschiedener Phase

$$y_1 = A_1 \cdot \sin(\omega t + \varphi_1)$$

$$y_2 = A_2 \cdot \sin(\omega t + \varphi_2)$$

- Die ungestörte Überlagerung dieser Schwingungen ergibt nach dem Superpositionsprinzip eine Schwingung y gleicher Frequenz, aber mit zunächst unklarer Amplitude und Phase, d.h. $y = y_1 + y_2 = A? \cdot \sin(\omega t + ?)$.

Man kann das natürlich mit den trigonometrischen Funktionen ausführen, aber die Amplitude A und die Phase φ der resultierenden Schwingung berechnet man weit einfacher in komplexer Schreibweise als mit **sin** und **cos** Funktionen - insbesondere wenn wir mehr als zwei Schwingungen überlagern.

- Dazu stellt man die Schwingungen y_1 und y_2 durch komplexe Zeiger dar:

$$y_1 \rightarrow \underline{y}_1 = \underline{A}_1 \cdot e^{i\omega t}$$

$$y_2 \rightarrow \underline{y}_2 = \underline{A}_2 \cdot e^{i\omega t}$$

- Für die komplexen Schwingungsamplituden \underline{A}_1 und \underline{A}_2 gilt:

$$\underline{A}_1 = A_1 \cdot e^{i\varphi_1}$$

$$\underline{A}_2 = A_2 \cdot e^{i\varphi_2}$$

- Anschließend überlagert man die komplexen Einzelschwingungen \underline{y}_1 und \underline{y}_2 durch schlichte **Addition**. Es folgt für \underline{y} :

$$\underline{y} = \underline{A}_1 \cdot e^{i\omega t} + \underline{A}_2 \cdot e^{i\omega t}$$

$$= (\underline{A}_1 + \underline{A}_2) \cdot e^{i\omega t}$$

$$= \underline{A} \cdot e^{i\omega t}$$

- Für die resultierende komplexe Amplitude gilt daher

$$\underline{A} = \underline{A}_1 + \underline{A}_2$$

- Die gesuchte **Schwingung** (der zeitabhängige Teil) y entspricht dem Imaginärteil der berechneten komplexen Schwingung \underline{y} . Daher gilt:

$$y = \text{Im}(\underline{y}) = \text{Im}(\underline{A} \cdot e^{i\omega t})$$

$$= A \cdot \sin(\omega t).$$

Das war eine einfache Überlagerung zweier Schwingungen. Es ist einleuchtend, daß bei komplizierteren Problemen die komplexe Darstellung enorme Vorteile hat.

Schwingkreise in der Elektrotechnik

- In der Wechselstromtechnik geht man von sinusförmigen Strom- und Spannungsverläufen aus. Daher ist es möglich, Strom und Spannung als komplexe Zeiger in der Gaußschen Ebene zu betrachten

$$\underline{u} = 2^{1/2} \cdot \underline{U} \cdot e^{j\omega t}$$

$$\underline{i} = 2^{1/2} \cdot \underline{I} \cdot e^{j\omega t}$$

- Den Quotienten aus der komplexen Spannung \underline{u} und dem komplexen Strom \underline{i} (**Achtung! Hier ist, wie in der Elektrotechnik üblich $i = \text{Strom}$ und $j = (-1)^{1/2}$**) bezeichnet man als **Impedanz** oder **Scheinwiderstand** \underline{Z}

$$\underline{Z} = \frac{\underline{u}}{\underline{i}} = R + j \cdot X$$

- Für einen (ohmschen) Widerstand R gilt: $\underline{u} = R \cdot \underline{i}$. Daher besitzt ein ohmscher Widerstand die **reelle** Impedanz $\underline{Z}_R = R$.
- Für eine **Kapazität** C gilt der folgende Zusammenhang zwischen Strom und Spannung:

$$\underline{i} = C \cdot \frac{d\underline{u}}{dt}$$

- Damit erhält man für die **Impedanz der Kapazität** C folgenden Wert

$$\underline{Z}_C = \frac{1}{j \cdot \omega \cdot C}$$

- Aus dem Induktionsgesetz erhält man folgenden Zusammenhang zwischen \underline{u} und \underline{i} für eine **Induktivität** L .

$$\underline{u} = L \cdot \frac{d\underline{i}}{dt}$$

- Daraus ergibt sich folgende **rein imaginäre** Impedanz \underline{Z}_L für die Induktivität

$$\underline{Z}_L = j \cdot \omega \cdot L$$

- Mit Hilfe dieser Impedanzen lassen sich Wechselstromkreise **einfach** berechnen. Dazu betrachten wir als Beispiel folgenden Reihenschwingkreis aus einem Widerstand R , einer Induktivität L und einer Kapazität C .

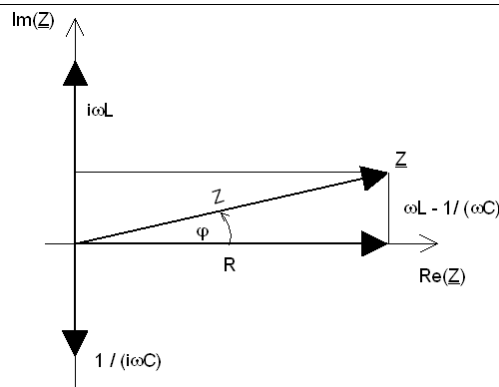


RLC-Reihenschwingkreis

- Nach den Kirchhoffschen Regeln erhält man die Gesamtimpedanz \underline{Z} des Wechselstromkreises durch **Addition der Impedanzen** der drei Bauteile

$$\underline{Z} = R + j \cdot \omega \cdot L + \frac{1}{j \cdot \omega \cdot C} = R + j \cdot \left(\omega \cdot L - \frac{1}{\omega \cdot C} \right)$$

- Die folgende Abbildung zeigt die Lage der **Gesamtimpedanz** \underline{Z} im Zeigerdiagramm, die sich aus der **graphischen Addition der einzelnen Zeiger** ergibt:



Zeigerdiagramm des Wechselstromkreises in Reihenschaltung

- Der **Wirkwiderstand** der Reihenschaltung ist der **Realteil** der Impedanz \underline{Z} ; $\text{Re}(\underline{Z}) = R$.
- Der **Blindwiderstand** der Reihenschaltung ist der Imaginärteil der Impedanz \underline{Z} ; $\text{Im}(\underline{Z}) = \omega L - 1/\omega C$.

- Der reelle **Scheinwiderstand** Z ist der Betrag des komplexen Vektors \underline{Z} .
Die Phasenverschiebung $\varphi = \varphi_u - \varphi_i$ zwischen Spannung und Strom läßt sich berechnen zu

$$\varphi = \arctan \frac{X}{R} = \arctan \left(\frac{\omega \cdot L - 1/\omega C}{R} \right)$$

- Das Verhältnis von \underline{Z}_L zu \underline{Z}_C bestimmt die Größe von φ und damit ob der Strom der Spannung nacheilt, ob die Spannung dem Strom nacheilt oder ob im Resonanzfall Strom und Spannung in Phase sind.

Ausblick auf komplexe Funktionen

- Hat man erst mal komplexe Zahlen mit all ihren Darstellungsarten und Rechenregeln, lassen sich natürlich jetzt auch **Funktionen mit komplexen Variablen** definieren.

- Damit ist ein großes und (auch für die Materialwissenschaft) sehr wichtiges Gebiet der Mathematik definiert, die **Funktionentheorie**.
- Es ergeben sich völlig neue und wunderbare Beziehungen, eine davon wollen wir uns mal genauer anschauen. Dazu betrachten wir die Lösungen der **Poisson Gleichung**, der Grundgleichung der Elektrostatik, die uns in der Halbleiterei laufend begegnen wird.

- Die **Poisson-Gleichung** der Elektrostatik lautet:

$$\Delta \Phi(x, y, z) = - \frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon \epsilon_0}$$

- Mit Δ = Delta operator ($\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$), $\Phi(x, y, z)$ = elektrostatisches Potential, $\rho(x, y, z)$ = Ladungsverteilung im Raum
- In **zwei** Dimensionen ist die Poissongleichung ein Spezialfall eines allgemeinen Typs von Differentialgleichungen der sehr häufig vorkommt: der **Laplace Gleichung**

$$\Delta \Phi = 0$$

ausgeschrieben

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0$$

- immer unter der Bedingung, daß Φ die spezifischen Randbedingungen erfüllt, auf irgendeiner Oberfläche konstant zu sein. Elektrostatisch heißt das z.B. einfach nur, daß die Oberfläche eines Leiters eine Äquipotentialfläche sein muß. Die Laplace - Gleichung ist damit eine typische Grundgleichung für viele **Randwertprobleme**.

- Es gibt keinen einfachen Weg um die Laplace - Gleichung (zusammen mit der spezifischen Randbedingung) zu lösen. Analytisch klappt es nur für relativ einfache Oberflächen.

- Jetzt betrachten wir mal eine **beliebige** komplexe Funktion $f(z)$ mit der komplexen Variablen $z = x + iy$ (und i ist wieder die imaginäre Einheit).

- Zum Beispiel

$$f(z) = z^2$$

$$f(z) = z \cdot \lg z$$

$$f(z) = \text{was immer einem einfällt}$$

- Für das erste Beispiel haben wir **ausgeschrieben**

$$f(z) = x^2 - y^2 + 2ix \cdot y$$

- Setzen wir eine komplexe Zahl mit dem Wertepaar (x, y) ein, erhalten wir als Funktionswert eine neue komplexe Zahl.

■ $f(z)$ lässt sich also auch *immer* schreiben als

$$f(z) = U(x, y) + i \cdot V(x, y)$$

- d.h. analog zur Darstellung der komplexen Zahl als Summe aus einer Funktion U die von *zwei reellen* Variablen x, y abhängt *plus* i mal eine andere Funktion V , die ebenfalls von den reellen Variablen x, y abhängt.

■ Das ist natürlich verallgemeinerbar: *Alle* komplexen Funktionen lassen sich so darstellen!

- Wir können also eine beliebige uns bekannte oder auch nur schreibbare Funktion $f(x)$ nehmen, statt x die komplexe Zahl z substitutionieren, und - nach kürzerer oder länglicher Rechnung - damit *zwei reelle Funktionen generieren*: $U(x, y)$ und $V(x, y)$.
- Und nun zum Überraschungseffekt:

- *Jede dieser unendlich vielen Funktionen $U(x, y)$ und $V(x, y)$ ist eine Lösung der Laplace Gleichung!*

- Wir wissen nur nicht, zu welchem konkreten Randwertproblem!

■ Den Beweis für diese Behauptung überlassen wir der Mathematik. Es sollte aber klar geworden sein, daß Funktionen komplexer Variablen für Überraschungen gut sind.

- Leicht verrückt: Wir kennen die Antwort - aber nicht die Frage! Wer das Kultbuch (so in den neunziger Jahren) "**The Hitchhikers Guide to the Galaxy**" von Douglas **Adams** (der in diesem Jahr (**2001**) gestorben ist) gelesen hat, wird sich jetzt fragen, ob Adams die Funktionentheorie kannte, denn das Buch (genauer gesagt alle **4** Bücher der Trilogie(?)) dreht sich genau um diese Frage:
- Die Antwort zu den letzten Fragen bezüglich des Leben, des Universums und überhaupt und so, ist bekannt; sie lautet: **42**. Nur die genaue Frage ist offen.

Interferenz und Beugung

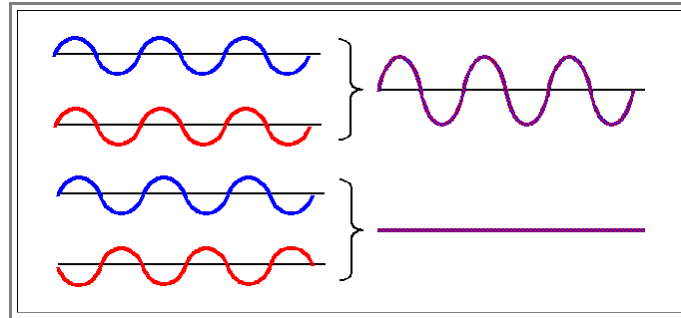
Basics

Interferenz und Beugung sind die beiden Schlagwörter, die man klassisch *nur* mit Wellen assoziiert.

- Interferenz ist das Fundamentalphänomen; Beugung ist eine Konsequenz der Interferenz, in der Regel benutzt man diesen Begriff falls Wellen mit *periodischen Strukturen* wechselwirken.

Interferenz heißt schlicht, daß bei der direkten Überlagerung von Wellen sich die Amplituden nicht einfach addieren, sondern je nach **Phasenbeziehung** verstärken oder schwächen können.

- Das kann bis zur *totalen Auslöschung* führen, falls eine Phasenverschiebung von genau 180° (oder π) vorliegt. Jeder kennt die simplen Bildchen dazu:



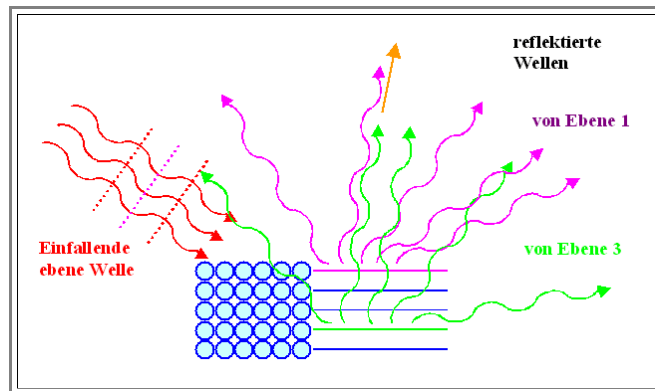
- Zwei *Wellen* gleicher Frequenz, die in dieselbe Richtung laufen, können sich zu einer Welle doppelter Amplitude verstärken oder komplett auslöschen - auch **konstruktive** oder **destruktive** Interferenz genannt.

- Zwei *klassische Teilchen* gleichen Impulses tun das nie, sie laufen einfach nebeneinander her.

Weniger bekannt ist schon, was passiert wenn *viele* Wellen mit allen möglichen Phasen miteinander interferieren. In der Antwort auf dieser Frage steckt nicht nur (mindesten) die halbe Quantentheorie (in der [Feynmanschen Formulierung](#)), sondern auch so simple Dinge wie das Reflexionsgesetz: "Einfallswinkel = Ausfallswinkel". Schauen wir uns das einmal in einer speziellen und idealisierten Version an.

- Wir lassen *eine* (ebene) Welle auf ein reflektierendes Material fallen. Da wir auf der Ebene der Atome schauen wollen, nehmen wir einen Idealkristall wie unten gezeigt.

- Die einfallende Welle kennt das Reflexionsgesetz (noch) nicht, wir nehmen ganz allgemein einfach mal an, daß ein Teil von ihr an jeder Atomlage in *alle möglichen* Richtungen reflektiert wird - das sieht dann so aus



- Um Zeichenarbeit zu sparen, sind im rechten Teil nur noch die Ebenen auf den Atome sitzen angegeben und ein paar der möglichen Wellen gezeigt, die unter beliebigen Winkeln an der ersten und dritten Ebene reflektiert werden. Alle andere Ebenen machen genau dasselbe, aber das Bild wird zu unübersichtlich, wenn man das alles einzeichnet.

Wie groß ist jetzt die Intensität der *gesamten* reflektierten Welle in eine ganz *bestimmte*, willkürlich herausgegriffene Richtung?

- Um das herauszufinden müssen wir nur *alle* Wellen, die von *allen* beteiligten Ebenen in *diese* Richtung reflektiert werden, aufaddieren - aber *phasenrichtig*, d.h. unter Berücksichtigung von Interferenz.

- Greifen wir beispielsweise die orange eingezeichnete Richtung heraus, sehen wir, daß schon die beiden eingezeichneten Teilwellen, die in diese Richtung laufen, *verschiedene* Phasen haben.

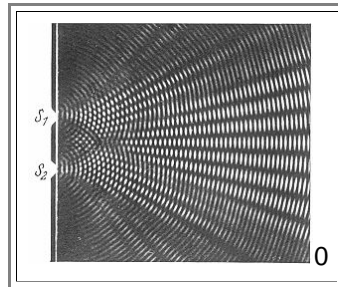
- Betrachten wir *alle* Teilwellen in diese Richtung, finden wir alle möglichen Phasen. Addieren wir alle auf, ist das Resultat = 0 !!!!!. Denn zu jeder Welle mit irgendeiner Phase, findet sich eine andere mit genau entgegengesetzter Phase (∞ viel Wellen, oder zumindest sehr viele, vorausgesetzt).

Nur für *eine* Richtung haben *alle* Wellen genau die gleiche Phase - und das ist, wenn man das ganze analysiert, die Richtung für die Ausfallswinkel = Einfallswinkel gilt (falls auch der Abstand der Atome noch "stimmt"; aber das ist eine Komplikation, die uns hier nicht beschäftigen soll).

- Was wir hier betrachtet haben, ist nichts weniger als die **Beugung** von Wellen an einer periodischen Struktur (am Beispiel war es eine dreidimensionale periodische Anordnung von Atomen - ein Kristall); alle Beugungseffekte resultieren aus der Interferenz der beteiligten Wellen.
- Für **Lichtwellen** hätten wir übrigens nicht in Dimensionen von Atomen schauen müssen - Dimensionen in der Größenordnung der Wellenlänge (d.h. ungefähr im μm Bereich) hätten genügt. Aber die Betrachtung gibt exakt das wieder was einem Elektronenstrahl (mit viel kleinerer **de Broglie Wellenlänge**) widerfährt, wenn er auf einen realen Kristall trifft: Er wird **gebeugt** - wie eine Welle!

Das "paradigmatische" Experiment zu Interferenz und Beugung ist natürlich das **Youngsche** Experiment der **Beugung am Doppelspalt**.

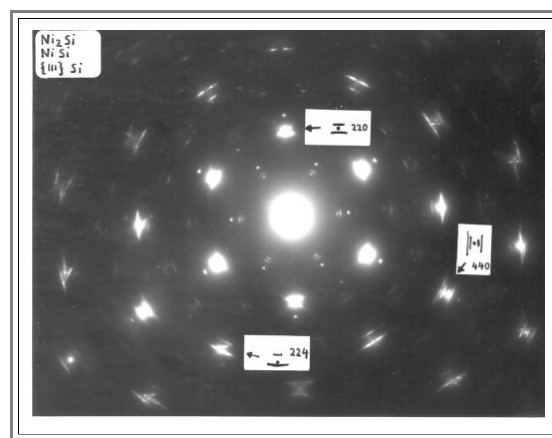
- Macht man das mit Licht, nimmt man an, daß von den (kleinen) Spalten jeweils ein Zylinderwelle ausgeht; die Interferenz der beiden Zylinderwellen gibt das bekannte Streifenmuster auf einem Bildschirm hinter der Anordnung:



- Hier eine besonders hübsche alte graphische Darstellung, erhalten durch die Überlagerung von Kreisen ausgehend von den beiden Spalten **S₁** und **S₂**

Und genau so sieht nicht nur die Intensitätsverteilung für Lichtwellen aus, sondern auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ für einen Elektronenstrahl.

- Dabei ist das eigentliche Mysterium, daß hier nicht **zwei** Elektronen "irgendwie" miteinander interferieren (ein gerne gemachter Gedankenfehler), sondern **ein** Elektron mit sich selbst!
- Zum Schluß noch ein richtiges Beugungsbild, wie man es von einem Elektronenstrahl erhält, der auf einen Kristall fällt (und in diesem Fall auf der anderen Seite wieder herauskommt).



- Die Probe war in diesem Fall eine Schichtung von drei sehr dünnen kristallinen Folien (**Si**, **NiSi**, und **Ni₂Si**); der Elektronenstrahl kommt, wenn man so will, senkrecht zum Bildschirm von hinten.
- Die exakte kristalline Struktur aller drei Materialien findet sich wieder in dem typischen Interferenzmuster, bestehend aus (mehr oder weniger scharf) definierten **Beugungspunkten**.

Potential

Basics

Der Begriff der **potentiellen Energie** oder des **Potentials** ist außerordentlich wichtig. Hier sollen kurz die wichtigsten wichtige Begriffe und Merkmale wiederholt werden

Abweichend von der sonst eher schlampigen Schreibweise sind hier Vektoren **fett und unterstrichen**, Skalare **fett und rot** dargestellt,

Wirkt auf einen Massenpunkt am Ort \underline{r} eine Kraft, die **nur** von den Koordinaten (und evtl. von der Zeit) abhängt, aber **nicht** z.B. von seiner Geschwindigkeit, wenn also gilt $\underline{F} = \underline{F}(\underline{r})$, dann sprechen wir davon, daß in dem betreffenden Gebiet ein **Kraftfeld** vorliegt. (Eine bekannte Ausnahme sind z.B. Reibungskräfte, die es aber im atomaren schlicht nicht gibt).

Wird der Massenpunkt von \underline{r}_1 nach \underline{r}_2 bewegt, muß Arbeit **A** geleistet werden; es gilt

$$A(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \int_{\underline{r}_1}^{\underline{r}_2} \underline{F} \cdot d\underline{r}$$

Es ist im allgemeinen nicht ausgeschlossen, daß die zu leistende Arbeit davon abhängt, auf **welchem Weg** man von \underline{r}_1 nach \underline{r}_2 geht, bei Arbeit gegen die Reibungskräfte wird das so sein.

Bei allen Kräften, die als **Kraftfeld** dargestellt werden können (d.h. als **Ableitung eines Potentials**, z.B. das Gravitationsfeld und das elektrische Feld), tritt diese Komplikation jedoch **nicht** auf, d.h. es ist **egal**, auf welchem Weg man von \underline{r}_1 nach \underline{r}_2 gekommen ist.

Wenn man nun zur Ermittlung der Arbeit immer vom gleichen Ort \underline{r}_1 ausgeht, ist die zu leistende Arbeit **nur noch** eine Funktion des Zielortes \underline{r}_2 , man nennt die zu leistende Arbeit dann die **potentielle Energie** oder das **Potential A_{pot}** des Ortes \underline{r}_2 .

Man muß sich aber immer bewußt sein, daß bei Angaben von Potentialen im Prinzip immer der Bezugspunkt oder Nullpunkt, d.h. der Ausgangspunkt \underline{r}_1 mit angegeben werden muß. Wählt man einen anderen Bezugspunkt, ändert sich das Potential!

Bei Änderungen des Bezugspunktes ändert sich das Potential um eine **konstante Größe**, die der Arbeit entspricht um vom ersten zum zweiten Bezugspunkt zu kommen.

Die Angabe aller Potentialwerte $A(\underline{x}, \underline{y}, \underline{z})$ definiert ein **Skalarfeld**, das die gleiche Information enthält wie das **Vektorfeld** der Kräfte. Durch Umkehrung des Linienintegrals für die Arbeit erhält man das Kräftefeld aus dem Potential durch **Differenzieren**, es gilt

$$\underline{F} = - \text{grad } A_{\text{pot}}$$

oder ausgeschrieben

$$F_x = - \frac{\partial A}{\partial x}, \quad F_y = - \frac{\partial A}{\partial y}, \quad F_z = - \frac{\partial A}{\partial z}$$

Das Vorzeichen ist **wichtig**! Es beschreibt das Vorzeichen der Kraft, die ein "Probeteilchen" zum Potentialminimum treibt, d.h. die **"rücktreibende"** Kraft.

Falls wir die Kraft betrachten, die **gegen** das Potential wirken muß, um ein Teilchen "nach oben" zu bringen, ist das Vorzeichen positiv.

Besonders einfach wird das Potential bei **Zentralkräften**, z.B. bei der Schwerkraft oder der Coulombkraft, bei der nur der Abstand $|\underline{r}| = r$ vom Bezugspunkt wichtig ist, d.h. wir $A(\underline{x}, \underline{y}, \underline{z}) = A(r)$ haben

Der Begriff des Potentials läßt sich noch viel weiter fassen, insbesondere verallgemeinern auf **thermodynamische Potentiale**. [Mehr dazu](#) im Link auf das "Defects" Hyperskript.

Näherungen

Basics

- Die Betrachtung eines beliebigen Atoms als ein "Ein-Elektron-System", bei dem die restliche Elektronen irgendwie verschmiert sind, ist eine ziemlich massive **Näherung** des eigentlichen Problems.

 - Manche wird (und sollte) sich jetzt fragen, ob man das so einfach "darf".
 - Die Antwort ist: Man (und frau) darf bei Näherungsannahmen über ein physikalisches System alles tun, was nicht den bekannten Naturgesetzen widerspricht. Ein Elektron im Potential einer irgendwie verschmierten positiven Elementarladung widerspricht keinem Naturgesetz; man **darf** das mal betrachten.
- Die wesentliche (und schwierige) Frage ist, ob das, was man als Ergebnis erhält, wirklich eine **gute Näherung** für das System ist, das man eigentlich beschreiben will.

 - Die Antwort auf diese Frage gibt im Zweifel nur das Experiment. Theoretisch läßt sich diese Frage nämlich nicht immer leicht beantworten.
- Man kann nun verschiedene Arten von Näherungen unterscheiden, zum Beispiel:
- Mathematische Näherungen:** Eine Funktion oder sonstiger Ausdruck wird durch einen einfacheren **ungefähren** ersetzt.

 - Dann kann man häufig ausrechnen, oder doch zumindest abschätzen, wie gut man liegt. Wenn man z.B. für "kleine" x den Sinus von x durch x ersetzt (**$\sin x \approx x$**), kann man den Fehler genau angeben und damit den Parameterbereich abschätzen, in dem die Näherung mit genügend kleinem Fehler gilt. Dies ist die Standardprozedur bei "mathematischen" Näherungen, bei denen man eine gegebene Formel durch eine einfachere ersetzt.
- Physikalische Näherungen.** Häufig läßt sich **ausrechnen**, daß bestimmte Einflußgrößen kaum Wirkung auf das betrachtete System zeigen können und weggelassen oder vereinfacht werden können.

 - So ist z.B leicht nachzuweisen, daß die Gravitationskraft, die der Mars auf die Erde ausübt, viel kleiner ist als die Anziehungskraft der Sonne. Damit ist klar, daß man keinen großen Fehler machen wird, wenn man den Mars bei entsprechenden Berechnungen einfach wegläßt.
- Verzweiflungsnäherungen.** Wenn man feststeckt, weil die Formel mathematisch nicht zu vereinfachen ist, und die Physik nicht sagt, was man weglassen kann, dann rechnet man eben ein "Hilfssystem", das dem zu Betrachtenden so nahe kommt wie es irgendwie geht, und **hofft**, daß die Ergebnisse irgendeine Relevanz für das eigentliche Problem haben.

 - Unsere Näherung für Atome gehört in diese Kategorie. Die erste Rechtfertigung für dieses Vorgehen liegt dann immer im Erfolg. Wenn die Ergebnisse zu den Experimenten passen, oder so eindeutig und einleuchtend sind, daß man an ihnen nicht vorbeikommt, dann hat man richtig "geraten".
 - Oft findet man erst später in mathematischer Strenge, warum die gemachte "Verzweiflungsnäherung" so gut war. Falsch ist es jedoch, jetzt anzunehmen, daß man immer so vorgehen kann. Denn die vielen "Verzweiflungsnäherungen", die schon gemacht wurden, die aber nicht geklappt haben, sind in den Lehrbüchern nicht dargestellt!
- Intuitionsnäherungen** oder besse **-ansätze**. Hier probiert man einfach mal ein neues Gesetz, eine neue Gleichung - wenn's klappt entdeckt man mit Glück die Quantentheorie, die Relativitätstheorie oder auch nur die Erklärung der Supraleitung.

 - Auch hier rechtfertigt der Erfolg das Vorgehen. Die Bohrschen Quantenbedingungen oder die Plancksche Strahlungsformel sind schöne Beispiele für diese Art der Näherungen.
 - Aber auch hier gilt: Viele Ansätze dieser Art waren nicht tragfähig und wurden früher oder später wieder eingemottet.

Borgruppe (Hauptgruppe III)

Basics

- Früher hießen diese Elemente auch **Erdmetalle**, da sie den [Erdalkalielelementen](#) relativ nahe stehen.
- Die technische Bedeutung von **Al**, ist klar (es ist übrigens das häufigste **Metall** in der Erdkruste), aber auch die anderen Elemente sind nicht unwichtig.
 - Ohne **B** als Dotierungselement des **Si** gäbe es keine Informationstechnologie, aber der Haupteinsatz von **B** ist wohl in der Glasindustrie. Die Kerntechnik braucht **B**, und **BN₃** ist genauso hart wie Diamant.
 - Ga** und **In** sind Grundelemente der [Optoelektronik](#), nur von **Tl** sollte man die Finger lassen - es ist hochgiftig, auch in Verbindungen.

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Bor <i>Boron</i>	Aluminium <i>Aluminium</i>	Gallium <i>Gallium</i>	Indium <i>Indium</i>	Thallium <i>Thallium</i>
Ordnungszahl	5	13	31	49	81
rel. Atommasse [<u>u</u>]	10,81	26,98	69,72	114,82	204,38
Schmelzpunkt [K]	2573	933,52	302,93	429,32	576,7
Schmelzpunkt [°C]	2300	660,52	29,93	156,32	303,7
Siedepunkt [K]	2823	2740	2676	2353	1730
Dichte [g/cm ³]	2,46	2,70	5,91	7,31	11,85
Ionisierungsenergie [eV]	8,30	5,97	6,0	5,79	6,11
Elektronegativität	2,0	1,5	1,8	1,5	1,4
Atomradius [pm]	83	143,1	122,1	162,6	170,4
Ionenradius [pm]	23	57	62	92	149
Oxidationszahlen	3	3	3, 2, 1	3, 2, 1	3, 1
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	op	fcc	op	tp	fcc 232 hcp
Gitterkonstante [Å] (a or c)	8,93 5,06	4,04	? ?	4,59 4,94	3,45 5,52
E - Modul [GPa]	?	70,5	(9,8)	10,5	8,0
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	2,3	23,3	18	40	29

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
 tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)
 dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)
 r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

Chalkogene (Hauptgruppe V)

Basics

- Die Chalkogene (griechisch "Erzbildner") heißen in unseren barbarischen, da zunehmend nicht mehr altgriechisch sprechenden Zeiten, zunehmend "Sauerstoffgruppe".
- Die Bedeutung von Sauerstoff muß nicht beschrieben werden; Polonium ist radioaktiv und nur von wissenschaftshistorischen Interesse.
- Schwefel und Selen sind wichtige Elemente.
- Schwefel ist ein Chemiegrundstoff und steckt z.B. in Autoreifen und ca. **100 000 000 t** Schwefelsäure (H_2SO_4) pro Jahr.
- Selen war und ist das Arbeitspferd bei Kopiermaschinen; es steckt auch in Solarzellen. **CuInSe₃** ist ein Halbleiter und z.Z. der einzige ernstzunehmende Konkurrent der **Si** Solarzellen.
- Tellur taucht in diversen halbleitenden Verbindungen auf, wird aber auch anderweitig eingesetzt - aber nur in bescheidenem Maßstab.

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Sauerstoff Oxygen	Schwefel Sulfur	Selen Selenium	Tellur Tellurium	Polonium Polonium
Ordnungszahl	8	16	34	52	84
rel. Atommasse [u]	16,0	32,07	78,96	127,6	208,98
Schmelzpunkt [K]	54,75	386	490	722,7	527
Schmelzpunkt [°C]	218,25	113	217	449,7	254
Siedepunkt [K]	90,19	717,82	958,1	1263	1235
Dichte [g/cm ³]	1,33	2,06	4,82	6,25	9,20
Ionisierungsenergie [eV]	13,62	10,36	9,75	9,01	8,42
Elektronegativität	3,5	2,4	2,5	2,0	1,8
Atomradius [pm]	60,4	104	116	143,2	167,5
Ionenradius [pm]	132	29	69	97	65
Oxidationszahlen	-2, -1	6, 4, 2, -2	6, 4, -2	6, 4, 2, -2	6, 4, 2
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	sc	op	r	r	op
Gitterkonstante [Å] (a or c)	?	?	?	4,45 5,91	?
E - Modul [GPa]	?	?	?	4,12	?
Therm. Ausdehnungskoeff. α [·10 ⁻⁶ K ⁻¹]	?	?	?	?	?

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 sc = simple cubic = kubisch-primitiv
 hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene
 op = simple orthorhombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)
 tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

8. Hauptgruppe - Edelgase

■ Nicht so spannend - wir haben Gase, auch noch bei sehr tiefen Temperaturen.

- **He** wird bei Normalüberdruck überhaupt nie fest, gerademal flüssig bei **4,2 K**. Damit hat es eine überragend wichtige Rolle in der Tieftemperaturphysik, die durch kein anderes Material ersetzt werden kann
- Aber auch die anderen Edelgase sind technisch wichtig: Als absolut inerte Schutzgase, oder in Form exotischer und instabiler Verbindungen; die moderne Mikroelektronik braucht zum Beispiel die **ArF₃** oder **KrF₃** *Excimer Laser* - was immer das auch ist.

Basics

■ *Tabellarische Datensammlung*

Name (Englisch)	Helium <i>Helium</i>	Neon <i>Neon</i>	Argon <i>Argon</i>	Krypton <i>Krypton</i>	Xenon <i>Xenon</i>	Radon <i>Radon</i>
Ordnungszahl	2	10	18	36	54	86
rel. Atommasse [u]	4,00	20,18	39,95	83,8	131,29	222,02
Schmelzpunkt [K]	0,95	24,48	83,78	120,85	166,1	211,4
Schmelzpunkt [°C]	-272,05	-248,52	-189,22	-152,15	-106,9	61,6
Siedepunkt [K]	4,216	27,1	87,29	120,85	166,1	211,4
Dichte [g/cm ³]	0,17	0,84	1,66	3,48	4,49	9,23
Ionisierungsenergie [eV]	24,587	21,56	15,76	14,0	12,13	10,75
Elektronegativität	K.A.	--	--	--	--	--
Atomradius [pm]	128	K.A.	174	K.A.	218	K.A.
Ionenradius [pm]	--	--	--	169	190	K.A.
Oxidationszahlen	--	--	--	2	2, 4, 6, 8	2
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	hcp	fcc	fcc	fcc	fcc	fcc
Gitterkonstante [Å] (a or c)	?	?	?	?	?	?
E - Modul [GPa]	?	?	?	?	?	?
Therm. Ausdehnungskoeff. α [10 ⁻⁶ K ⁻¹]	?	?	?	?	?	?

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = kubisch flächenzentriert; Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

Erdalkali Elemente (Hauptgruppe II)

Basics

- Die **Hauptgruppe IIA** umfaßt die **Erdalkalimetalle**.
- In der Häufigkeit der Erdalkalimetalle steht Calcium an erster Stelle, gefolgt von Magnesium.
 - Wesentlich seltener sind Barium, Strontium und Beryllium, wohingegen Radium nur als Zwischenprodukt in radioaktiven Zerfallsreihen auftritt.
 - Der Anteil der Erdalkalimetalle an der Bildung der Erdkruste liegt bei etwas mehr als **4 Prozent**. Wegen ihrer Reaktivität treten sie unter natürlichen Bedingungen niemals elementar auf.
- Die Erdalkalimetalle sind silbrig-weiße, glänzende Leichtmetalle mit unterschiedlicher Härte. An der Luft überzieht sich ihre Oberfläche schnell mit einer dünnen Oxidschicht.
 - Sie haben Schmelzpunkte zwischen **649 °C** (Magnesium) und **1278 °C** (Beryllium) bzw. Siedepunkte zwischen **1107 °C** (Magnesium) und **2970 °C** (Beryllium). Sie sind damit generell höher schmelzend als die Alkalimetalle. Auch ihre Dichte und die **1. Ionisierungsenergie** ist größer als die der Elemente der ersten Hauptgruppe.
 - Erdalkalimetalle sind gute elektrische Leiter.
- Erdalkalimetalle haben zwei Außenelektronen und sind weniger reaktiv als die Alkalimetalle. Sie gehören aber immer noch zu den reaktivsten Metallen nach diesen. Die Oxidationszahl ist stets **+2**.
 - Mit steigender Ordnungszahl steigt die Reaktivität der Erdalkalimetalle. Beryllium und Magnesium reagieren mit Wasser im Gegensatz zu den anderen Elementen der Gruppe sehr langsam, denn die entstehende Hydroxidschicht erschwert den weiteren Wasserangriff.
 - Demgegenüber reagieren Calcium, Strontium und Barium schon mit kaltem Wasser heftig. Anders als die Salze der Alkalimetalle sind viele der Erdalkalimetalle nur wenig in Wasser löslich.

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Beryllium <i>Beryllium</i>	Magnesium <i>Magnesium</i>	Calcium <i>Calcium</i>	Strontium <i>Strontium</i>	Barium <i>Barium</i>	Radium <i>Radium</i>
Ordnungszahl	4	12	20	38	56	88
rel. Atommasse [u]	9,01	24,31	40,08	87,62	137,33	226,03
Schmelzpunkt [K]	1551	921,95	1112	1042	998	973
Schmelzpunkt [°C]	1278	648,95	839	769	725	700
Siedepunkt [K]	3243	1380	1760	1657	1913	1413
Dichte [g/cm ³]	1,85	1,74	1,54	2,63	3,65	5,50
Ionisierungseng. eV	9,32	7,65	6,11	5,70	5,21	5,28
Elektronegativität	1,5	1,2	1,0	1,0	1,0	1,0
Atomradius [pm]	113,3	160	197,3	215,1	217,3	223
Ionenradius [pm]	34	78	106	127	143	152
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	hcp	hex	hcp 440 fcc	bcc 540 hcp 234 fcc	bcc	?
Gitterkonstante [Å] (a or c)	2,29	3,20	5,56 ?	6,09 ?	5,02	?
E - Modul [GPa]	310	44,3	19,6	15,7	12,7	?

Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	11,5	26	22	?	19	?
---	------	----	----	---	----	---

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = kubisch flächenzentriert; Gitterkonst. = a
 bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
 hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

Flächen

Basics

Bei der Flächenbetrachtung finden wir als **Basiseinheit** wieder eine Komponente des Meters, den **Quadratmeter** und seine Vielfachen.

Wo zwischen Meter und Kilometer eine große Lücke klafft, gibt es zwischen Quadratmeter und Quadratkilometer gewisse Einheiten, die das Rechnen etwas vereinfachen:

- Das **Ar**; Zeichen **a**, vom lateinischen *area* = Fläche. Ein gesetzliches Maß mit

$$1 \text{ a} = 100 \text{ m}^2$$

- Der (auch das) **Hektar** (**ha**) ist eine Kombination des griechischen *hekatón* für hundert und des lateinischen *area* für Fläche; also .

$$1 \text{ ha} = 100 \text{ a} = 10\,000 \text{ m}^2$$

- Der **Morgen**, ein älteres deutsches Feldmaß, ursprünglich das Stück Land, das man an einem Morgen pflügen konnte; schwankt regional zwischen ca. **0,255 ha** (in Preußen) und **1,2 ha** (in Oldenburg; legt interessante Schlußfolgerungen über die relative Arbeitsmoral nahe); heute gilt häufig .

$$1 \text{ Morgen} = 2\,500 \text{ m}^2 = 0,25 \text{ ha}$$

Auch bei den Flächen gibt es das angloamerikanische Gegenstück zum Quadratmeter. Benutzt wird aber meist:

- Der "*Square inch*" (sq.in.); es gilt

$$1 \text{ sq.in.} = (2,54 \text{ cm})^2 = 6,452 \text{ cm}^2$$

- Der "*Square foot*" (sq.ft.) = $(12 \text{ in.})^2 = 144 \text{ sq. in.} = 929,1 \text{ cm}^2$. Halbwegs leicht zu merken ist die *grobe* Näherung

Grobe Näherung

$$10 \text{ sq.ft.} = 0.93 \text{ m}^2 \approx 1 \text{ m}^2$$

Bessere Näherung

$$11 \text{ sq.ft.} = 1.02 \text{ m}^2 \approx 1 \text{ m}^2$$

- "*Square Yards*" werden eher selten gebraucht, wohl aber der
- "*Acre*", der **160 "*square rods*"** oder **4 840 square yards** enthält (in **USA** und Großbritannien, selbstverständlich ist er in Schottland und Irland anders definiert). Wir haben also

$$1 \text{ acre} = 4\,840 \text{ sq.yd.} = 9 \cdot 4\,840 \text{ sq.ft.} = 43.560 \text{ sq.ft.} = 0,405 \text{ ha} = 4050 \text{ m}^2$$

Halogene (Hauptgruppe VII)

Basics

- Die Halogene sind aggressive Gase bzw. Feststoffe (I) mit hoher Elektronegativität. Astat ist radioaktiv und spielt keine Rolle
- Fluor bildet vermutlich die meisten chemischen Verbindungen überhaupt; es ist technisch von großer (chemischer) Bedeutung; spielt aber auch eine überragende Rolle in der Halbleiterindustrie (ohne Flußsäure (HF), gäbe es keine Mikroelektronik). Aber auch "Exoten" wie WF_6 sind sehr wichtig in der Halbleiterindustrie
- Calciumfluorid (Flußspat) ist nicht nur das universelle Flußmittel in der Metallindustrie: [optische Linsen](#) aus einkristallinem CaF_2 sind derzeit der letzte Schrei in der sub- μm Lithographie für die nächste und übernächste Generation an Chips.
- Chlor ist einer der wichtigsten Grundstoffe der Chemie; wir müssen das nicht vertiefen.
- Brom und Iod fallen in der Bedeutung zurück, aber werden für viele spezielle Anwendungen (auch in der Medizin) gebraucht. Insbesondere lichtempfindliche Schichten (Filme) enthalten (und enthalten vielleicht noch) Bromide und Iodide.
- Früher wurde Iod übrigens "Jod" geschrieben
- Tabellarische Datensammlung

Name	Fluor <i>Fluorine</i>	Chlor <i>Chlorine</i>	Brom <i>Bromine</i>	Iod <i>Iodine</i>	Astat <i>Astatine</i>
Ordnungszahl	9	17	35	53	85
rel. Atommasse in u	19	35,45	79,90	126,90	209,99
Schmelzpunkt [K]	53,53	172,17	265,9	386,65	575
Schmelzpunkt [K]	-219,5	-100,8	-7	113,6	302
Siedepunkt [K]	85,01	238,55	332,93	457,55	610
Dichte [g/cm ³]	$1,58 \cdot 10^{-3}$	$2,95 \cdot 10^{-3}$	3,14	4,94	?
Ionisierungsenergie [eV]	17,42	12,97	11,81	10,45	9,5
Elektronegativität	4,1 (largest)	2,8	2,7	2,2	2,0
Atomradius [pm]	70,9	99,4	114,5	133,1	?
Ionenradius [pm]	133	181	196	220	227
Oxidationszahlen	-1	-1; 7,5,3,1	-1; 7,5,3,1	-1; 7,5,3,1	-1; 7,5,3,1
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	?	tet	op	op	?
Gitterkonstante [Å] (a or c)	-	-	-	-	-
E - Modul [GPa]	-	-	-	-	-
Therm. Ausdehnungskoeff. α [$\cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$]	-	-	-	-	-

Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.

fcc = face centered cubic = kubisch flächenzentriert; Gitterkonst. = a

bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert

sc = simple cubic = kubisch-primitiv

hp = simple hexagonal = hexagonal

op = orthorhombic

tet = tetragonal

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung;

Gitterkonst. = c in Basisebene

Kohlenstoffgruppe (Hauptgruppe IV)

Basics

- Unsere wichtigste Gruppe - ohne Kohlenstoff kein Leben, ohne **Si** keine Informationstechnologie
- Die Bedeutung der organischen Chemie braucht nicht betont werden, aber auch reiner Kohlenstoff, in der Form von Graphit für die Industrie und in der Form von Diamant für die Damen (und uns), ist von großer Bedeutung (von Erdöl und Kohle mal ganz zu schweigen).
- Auch über **Si** in der Mikroelektronik muß nicht berichtet werden. Nicht vergessen sollte man aber auch, daß Silikone nicht nur in der [Verschönerungsindustrie](#) eine bedeutende Rolle spielen, sondern auch als "Kunststoffe" mit besonderen Eigenschaften. Darüber hinaus wird **Si** als Zuschlagsstoff in der Stahlindustrie in großen Mengen eingesetzt. Außerdem sind fast alle Gläser und viele Keramiken sehr **Si** haltig.
- Si** ist im übrigen nach Sauerstoff das zweithäufigste Element in der Erdkruste.
- Germanium war in den **50er** Jahren das Schlüsselement der Halbleiterei, spielt aber heute nur noch eine winzige Nebenrolle in der Halbleiterindustrie. Benutzt wird es als Zuschlagsstoff zu Gläsern.
- Zinn und Blei sind den anderen Vertretern der **IV** Hauptgruppe sehr unähnlich; es sind Metalle - gerade noch so.
- Beide sind schon seit [antiker](#) Zeit sehr wichtige Elemente mit vielen Anwendungen. **SnO₂** ist darüberhinaus ein Halbleiter mit weitreichenden Anwendungen im Sensorbereich.

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Kohlenstoff <i>Carbon</i>	Silicium <i>Silicon</i>	Germanium <i>Germanium</i>	Zinn <i>Tin</i>	Blei <i>Lead</i>
Ordnungszahl	6	14	32	50	82
rel. Atommasse [u]	12,01	28,09	72,61	118,71	207,2
Schmelzpunkt [K]	3823	1683	1210,55	505,12	600,65
Schmelzpunkt [°C]	3550	1410	937,55	232,12	327,65
Siedepunkt [K]	5100	2628	3103	2543	2013
Dichte [g/cm ³]	3,51	2,33	5,32	7,29	11,34
Ionisierungsenergie [eV]	11,26	8,15	7,90	7,34	7,42
Elektronegativität	2,5	1,7	2,0	1,7	1,6
Atomradius [pm]	77,2	117	122,5	140,5	175,0
Ionenradius [pm]	16	26	53	93	132
Oxidationszahlen	4, 2, -4	4, -4	4, 2	4, 2	4, 2
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	dia ? hcp	dia	dia	tp 13 dia	fcc
Gitterkonstante [Å] (a or c)	? ?	5,43	5,66	5,82 3,18	4,95
E - Modul [GPa]	?	13	?	54,3	16,2
Therm. Ausdehnungskoeff. α [·10 ⁻⁶ K ⁻¹]	?	?	?	?	28

- Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.
- fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a
bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert
sc = simple cubic = kubisch-primitiv
hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)

tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

"Lectures of Physics"

von [Richard Feynman](#)

Basics

- Richard Feynman hatte seine eigenen Ansichten über Gott und die Welt, und lebte auch danach. **1961/62** übernahm er die Aufgabe, an seiner Universität, dem "Caltech" (California Institut of Technology"; eine der renommiertesten amerikanischen Universitäten), den Einführungskurs in Physik zu lehren.
- Selbstverständlich machte er es ganz anders als gewohnt - das Skript zur Vorlesung, ergänzt und redigiert durch **R. Leighton**, wurde ein Klassiker. Die "**roten Bibeln**" fehlen in keiner Universitätsbibliothek und haben vielen Naturwissenschaftlern und Ingenieuren geholfen zum erstenmal zu **verstehen**, was sie mühsam **gelernt** hatten!
- Allerdings verlangte Feynman zuviel von den Studierenden. Sein Weg, der das Verständnis des Stoffes, die tiefen Grundsätze und Prinzipien, in den Vordergrund stellte, und dafür das Handwerk - die Mathematik und die Querbeziehungen - zwar elegant behandelte, aber doch eher im Hintergrund hielt, war zu schwierig für die Anfänger.
- Insofern sind die "Lectures" heute eher Nachschlagwerk oder Bettlektüre für all diejenigen, die schon ein bißchen Bescheid wissen.
- Es lohnt sich aber auch für "Anfänger", einzelne Kapitel zu lesen, weil sie oft für sich verstanden werden können, und immer wieder zu den berühmten "Aha-Effekten" führen: Plötzlich versteht man große Gedanken und Zusammenhänge, die man bisher kaum erahnte.
- Besonders zu empfehlen:
 - Band I, Kapitel 6 "**Probability**".
 - Band I, Kapitel 22 "**Algebra**"
Von der Addition ganzer Zahlen zur Euler Beziehung
 $e^{i\delta} = \cos\delta + i\sin\delta$
der "bemerkenswertesten Formel der Mathematik" - gerade mal **10** Seiten! Ein echter "Eye opener".
 - Band I, Kapitel 26 "**The Principles of Least Time**".
 - Band I, Kapitel 46 "**Ratchet and Pawl**" (ruhig mal selber rausfinden, was das ist).
 - Band II, Kapitel 7 "**The Electric Field in Various Circumstances**" mit einem kleinen, verblüffenden Ausflug in die [Funktionentheorie](#) (Ob **Douglas Adams** ("**The Hitchhikers Guide to the Galaxy**") das gelesen hat?).
 - Band II, Kapitel 19 "**The Principle of Least Action**" Ganz nebenbei wird die **Variationsrechnung** eingeführt.
 - Band II, Kapitel 28 "**Electromagnetic Mass**". Wie groß ist die Energie **E**, die im elektrischen Feld eines Elektrons steckt (und damit seine Masse $m = E/c^2$)? Die Frage hängt mit der fundamentalen Annahme zusammen, daß das Feld einer gegebenen (Punkt)ladung auf sich selbst keine Kraft ausübt - nur auf andere Ladungen. Geht man der Frage nach - mit durchaus einfachen Mitteln - stürzt früher oder später das ganze Gebäude der Elektrodynamik in sich zusammen! Unlösbare Probleme treten auf.
 - Band II, Kapitel 42 "**Curved Space**".
- Es ist ein wenig ironisch, daß ausgerechnet Band **III** - die Quantentheorie; Feynmans Spezialgebiet - der schwächste der Serie ist. Der eingeschlagene Weg ist recht verschieden vom konventionellen Weg (der in der Regel mehr oder weniger über die Schrödingergleichung führt). Einzelne Kapitel sind kaum für sich lesbar - man muß in Band **III** schon ganz von vorne anfangen.
- Zu unserem Thema, den Atomen, schreibt Feynman in Band I, Kapitel 1:

If, in some cataclysm, all of scientific knowledge were to be destroyed, and only one sentence passed on to the next generations of creatures, what statement would contain the most information in the fewest words? I believe it is the *atomic hypothesis* (or the atomic fact, or whatever you wish to call it) that *all things are made of atoms - little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another.*

- Nach knapp **2500** Jahren sollte **Demokrit** also recht behalten! Und im Unterschied zu damals, wird es den Aristotelikern nicht mehr gelingen, diese Tatsache in Frage zu stellen, denn wir wissen, daß die "Hypothese" stimmt. Sie ist eine [absolute Wahrheit](#), ganz gleich was "[Denker](#)" dazu meinen .

Lanthanoide und Actinide

- Lanthanoide (oder Lanthanide) wurden früher "seltene Erden" genannt - dabei sind sie gar nicht besonders selten (außer Prometheum, das radioaktiv ist).
 - Die Lanthanoiden sind sich nur chemisch überaus ähnlich, weil ihre äußeren Schalen identisch sind und nur die inneren 4f-Orbitale sukzessive aufgefüllt werden.
 - Während keine "Massenanwendungen" existieren, sind Lanthanoide doch sehr wichtig für viel High-Tech Materialien, vor allem bei Leuchtstoffen, als Färbemittel, in Magnetwerkstoffen und in Lasern. Von Cer werden beispielsweise einige 1000 to im Jahr verkauft.
 Die Actiniden sind alle radioaktiv und können in größeren Mengen nur künstlich erzeugt werden.
 - Die technische Bedeutung einiger Elemente (insbondere Plutonium) ist zwar groß, aber so speziell (Uran) oder schlicht verabscheuungswürdig, daß wir uns damit nicht befassen wollen.

Basics

Name (Englisch)	Lanthan <i>Lanthanum</i>	Cer <i>Cerium</i>	Praseodym <i>Praseodymium</i>	Neodym <i>Neodymium</i>	Promethium <i>Promethium</i>	Samarium <i>Samarium</i>	Europium <i>Europium</i>	Gadolinium <i>Gadolinium</i>	Terbium <i>Terbium</i>	Dysprosium <i>Dysprosium</i>	Holmium <i>Holmium</i>	Erbium <i>Erbium</i>	Thulium <i>Thulium</i>	Ytterbium <i>Ytterbium</i>	Lutetium <i>Lutetium</i>
Ordnungszahl	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
rel. Atommasse [u]	138,9	140,1	140,9	144,2	146,9	150,3	151,25	157,2	158,9	162,5	164,9	167,2	168,9	173	174,9
Schmelzpunkt [K]	1193	1069	1204	1283	1353	1345	1095	1584	1633	1682	1743	1795	1818	1097	1929
Schmelzpunkt [°C]	920	796	931	1010	1080	1072	822	1311	1360	1409	1470	1522	1545	824	1656
Siedepunkt [K]															
Dichte [g/cm³]	6,16	6,77	6,48	7,00	7,22	7,54	5,25	7,89	8,25	8,56	8,78	9,05	9,32	6,97	9,84
Ionisierungsenergie [eV]	5,57	5,47	5,42	5,49	5,55	5,63	5,67	6,14	5,85	5,93	6,02	6,10	6,18	6,25	5,42
Elektronegativität															
Atomradius [pm]															
Ionenradius [pm]															
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]															
Gitterkonstante [Å] (a or c)															
E - Modul [GPa]															
Therm. Ausdehnung- koeff. α [10 ⁻⁶ K ⁻¹]															

Das Lichtjahr, die Astronomische Einheit und das Parsec

Das Lichtjahr

Basics

Das Lichtjahr ist zwar im Einheitengesetz nicht festgelegt, doch es ist in der Astronomie die übliche Einheit, neben dem *Parsec* oder der *Astronomischen Einheit*. Wie der Name schon sagt, ist mit einem Lichtjahr die Entfernung oder die Strecke festgelegt, die das Licht in einem Jahr im luftleeren Raum zurücklegt.

- Das Licht legt in der Sekunde ungefähr die Strecke Erde-Mond zurück, eine Licht*sekunde* entspricht also ca. **300 000 km** - das ist am einfachsten zu merken.
- Exakt ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes $c = 299.792.458 \text{ m/s}$. Das Jahr hat $3,16 \cdot 10^7$ Sekunden, damit ist die Entfernungseinheit **1 Lichtjahr = $9,46 \times 10^{15} \text{ m}$** .
- In Kilometer sind es $9,46 \times 10^{12} \text{ km}$; in Worten **9,46 Billionen km** oder **5,88 Trillionen miles**.

In der Umgangssprache wird die Einheit "Lichtjahr" zunehmend (und falsch) auch gerne für lange *Zeiten* benutzt ("...es ist Lichtjahre her...").

Die Astronomische Einheit und das Parsec

Unter der *Astronomischen Einheit* (**AE**) versteht man den mittleren Abstand der Erde zur Sonne.

- Damit haben wir: Mittlerer Erdbahnradius gleich **1 AE = $149,6 \cdot 10^6 \text{ km}$**
- Verglichen mit dem Lichtjahr ist das nicht viel, die **AE** ist damit nur geeignet um Entfernungen innerhalb des Sonnensystems zu erfassen.

Nun zum *Parsec*. Durch die jährliche Bewegung der Erde um die Sonne scheinen die erdnahen Sterne bei genauerer Betrachtung eine Bewegung vor dem weit entfernten, unbeweglichen Sternenhintergrund zu vollführen.

- Steht der nahe Stern senkrecht über der Erdumlaufebene, so führt der Stern eine scheinbare Kreisbewegung aus. Ist die Position des Sternes geneigt, wird aus dem Kreis eine Ellipse, deren große Halbachse dem Kreisradius bei senkrechtem Stand entspricht.
- Verfolgt man über ein Jahr hin die genaue Position des Sterns bezüglich seiner weit entfernten und damit festen Nachbarsterne, so lässt sich dabei der Öffnungswinkel der Ellipsenhauptachse messen. Dieser Winkel, unter dem vom Stern aus der Erdbahnradius gesehen wird, heißt *Parallaxe*. Zwischen der Parallaxe, dem Erdbahnradius und der Entfernung besteht eine einfache trigonometrische Beziehung.

Parsec steht nun einfach für "*Parallaxensekunde*" und ist die Strecke die einer Winkelsekunde Parallaxe bezogen auf eine Basis von einer **AE** entspricht. In anderen Worten: Ein Parsec ist die Entfernung von der aus der Erdbahnradius **a = 1 AE** unter der Parallaxe $\Delta = 1 \text{ Sekunde}$ erscheint.

- Aus der Parallaxe und dem Erdbahnradius lässt sich die Entfernung berechnen. Allerdings sind selbst für die erdnächsten Sterne die Parallaxen sehr klein. In den meisten Fällen betragen sie weniger als **0,5 Sekunden = $0,5''$** . (**1 Sekunde = 1 Grad : 3600**).

Umrechnungstabelle

1 Lichtjahr	=	$9,46 \times 10^{15} \text{ m}$
	=	$9,46 \times 10^{12} \text{ km}$
	=	9,460526 Pm (<i>Pentameter</i>)
	=	9.460.526 Gm (Gigameter)
	=	0.3067 pc (<i>Parsec</i>)
1 Parsec (pc)	=	3,26 Lj
	=	$30,86 \times 10^{12} \text{ km}$

Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion

Basics

Die **absolute** Wahrscheinlichkeit **w**, ein Elektron in einem differentiell kleinen Volumen **dV** zu finden ist .

$$w = \psi \cdot \psi^* \cdot dV$$

- Dabei ist **w** **immer** eine reelle **Zahl** zwischen **0** und **1**.
- Die Zahl die man erhält wenn man $\psi \cdot \psi^*$ mit dem **differentiellen Volumen** $dV = dx dy dz$ multipliziert, geht natürlich gegen **0** für **dV** gegen Null.
- Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem konkreten Punkt (mit Ausdehnung **0**) zu finden ist deshalb **immer 0** - **und das ist nicht sehr hilfreich**.

Dividiert man **w** durch **dV** erhält man $\psi \cdot \psi^*$; dies ist dann eine **Dichte**, nämlich die **Wahrscheinlichkeitsdichte** am Punkt **(x, y, z)**.

- Diese Zahl kann **beliebige** Werte annehmen, sie kann insbesondere auch **> 1** sein (was eine absolute Wahrscheinlichkeit **nicht** darf).

Die Wahrscheinlichkeits**dichte** $\psi \cdot \psi^*$ für **s** - Elektronen ist nun offenbar **im Atomkern, d.h. bei $r = 0$ am höchsten**.

- **Aber so paradox das auch klingen mag**: Das sagt aber nicht unbedingt etwas darüber aus, wo man ein Elektron bei einem gegebenen Experiment **am ehesten** finden wird.
- Sucht man in einem **dV** um einen gegebenen **Punkt (x,y,z)**, ist es tatsächlich umso wahrscheinlicher ein Elektron zu finden, je näher man dem Kern kommt. Denn in diesem Fall ist $\psi \cdot \psi^*$ mit $dV = dx dy dz = \text{const}$ zu multiplizieren.
- Das ist jedoch **kein** sinnvolles Suchkriterium beim Vorliegen einer **Radialsymmetrie**, d.h. wenn ψ nur eine Funktion des Abstands **r** ist.

Sinnvoller ist dann die Frage: Wie groß die Wahrscheinlichkeit **W(r)**, das Elektron **irgendwo im Abstand r**, oder genauer gesagt, in der Kugelschale zwischen **r** und **r + dr** zu finden.

- Dazu ist $\psi(r) \cdot \psi(r)^*$ mit dem (differentiellen) Volumen dieser Kugelschale zu multiplizieren.
- Dieses Volumen **dV(r)** ist gegeben durch die Oberfläche der Kugel bei **r**, multipliziert mit der (differentiell kleinen) Höhe **dr**, wir haben

$$dV(r) = 4\pi \cdot r^2 \cdot dr$$

Um **W(r)** zu erhalten müssen wir also die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi \cdot \psi^*$ mit $4\pi \cdot r^2 \cdot dr$ multiplizieren. Wir erhalten zunächst **W(r = 0) = 0**, und bei genauerem Überlegen eine Funktion, die bei einem bestimmten **r** ein Maximum hat und im Atomkern Null ist - also ein komplett verschiedenes Ergebnis.

- Die Funktion **W(r)** heißt **radiale Verteilungsfunktion**. Der Ort des Maximums entspricht dann genau dem Bohrschen Radius **r₀**

Ähnliche Betrachtungen gelten für alle Fälle, in denen **radialsymmetrische** Strukturen vorliegen.

- Bei amorphen Körpern ist z.B. die Wahrscheinlichkeit, ein Atom im Abstand **r** von einem gewählten Ursprung zu finden, in alle Raumrichtungen gleich (dies ist die Definition von "Amorph").

Die exakt gleiche Thematik wird uns beim Grundphänomen der Diffusion [wieder beschäftigen](#).

- Zur mentalen Gymnastik dazu stellen wir uns mal folgende einfache Frage: Wir betrachten eine Folge von Volltrunkenen, die aus einer bei **x,y = 0** gelegenen Kneipe heraustorkeln und eine **Zufallsbewegung** (random walk) ausführen. Jeder Schritt ist **50 cm** lang und führt mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach vorne, hinten, links und rechts (wir haben (zweidimensionale) Radialsymmetrie).
- Wir lassen eine große Zahl von Betrunkenen "laufen" und messen die Verteilung nach **100** Schritten, d.h. wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit, bei **(x,y)** einen Betrunkenen zu finden.
- Alternativ fragen wir nach der Wahrscheinlichkeit, im Abstand **r** von der Kneipe einen Betrunkenen zu finden. Die Antwort, die zu einer der wichtigsten Formeln der Materialwissenschaft führt, paßt genau in das obige Schema.

Das Meter

Basics

- Das Wort "Meter" kommt von dem griechischen Wort "*metron*", das für "Maß" steht. Das Einheitenzeichen ist **m**.
- Das Meter ist die Längeneinheit mehrerer physikalischer und in der Wissenschaft und Technik gebräuchlicher Maßsysteme. Es sollte ursprünglich der **40millionste** Teil des Erdumfangs sein (Meterkonvention **1875**).
- Im Jahre **1889** ließ die Französische Nationalversammlung einen **1 Meter** langen Stab aus Platin-Iridium gießen, der von der vorherigen Definition etwas abweicht. Kupfer-Repliken werden in alle Teile des Landes verschickt. Doch ein Jahrhundert später, als sich das Meter in Europa eingebürgert hat, erkennen Wissenschaftler, daß das Pariser Urmeter zu ungenau ist.
- Während der **11. Generalkonferenz für Maß und Gewicht (1960)** wurde das Meter neu definiert als das **1.650.763,73-fache** der Wellenlänge der von Atomen des Kryptonisotops **⁸⁶Kr** (Krypton) beim Übergang vom Zustand **5d⁵** zum Zustand **2 p¹⁰** ausgesandten, sich im Vakuum ausbreitenden Strahlung.
- Aber auch das war nicht genau genug und **1983** wurde das Meter wiederum neu definiert als die **Länge der Strecke**, die das Licht im Vakuum in einer Zeitspanne von **1/299.792.458 s** durchläuft.
- Länge ist damit über eine der universalen Naturkonstanten, der Lichtgeschwindigkeit **c**, an die Zeitmessung gekoppelt.
- Um die Rechnung mit der Einheit Meter zu vereinfachen und um Verwirrung stiftende Brüche zu vermeiden, gibt es einige gebräuchliche Vielfache, wie der "**Zentimeter**", "**Millimeter**", "**Dezimeter**" oder "**Kilometer**", die wohl jeder kennt.
- Es gibt aber auch eher unbekannte Vielfache, die Definitionen und Beziehungen sind in der folgenden Tabelle erläutert.

Umrechnungstabelle

Meter	(m)	=	10 dm = 100 cm = 1000 mm
Millimeter	(mm)	=	0,001 m (10^{-3} m)
Mikrometer	(µm)	=	0,001 mm = 10^{-6} m
Nanometer	(nm)	=	0,001 µm = 10^{-9} m
Femtometer	(fm)	=	0,001 Å = 10^{-13} m
Ångström	(Å)	=	0,1 nm = 10^{-10} m <i>immer noch beliebt.</i>
Kilometer	(km)	=	1000 m
Gigameter	(Gm)	=	1.000.000 km = 10^9 m
Petameter	(Pm)	=	1.000.000 Gm = 10^{15} m <i>ziemlich ungebräuchlich.</i>
<u>Astronomische Einheit</u>	(AE, AU)	=	149, 59787 Gm .
<u>Lichtjahr</u>	(Lj)	=	9,460528 Pm .
<u>Parsec</u>	(pc)	=	30,856776 Pm .

Die alten Griechen und das Atom

Jeder weiß, daß die Idee der Atome (mindestens) auf die alten Griechen zurückgeht. Soweit die Überlieferungen reichen, lief die Geschichte ungefähr so:

- **Leukipp**, ein griechischer Philosoph des 5. Jahrhunderts (um 450 - 370 v. Chr.), von dessen Existenz und Werk wir nur wissen, weil **Aristoteles** darauf hinweist, hat die Idee wohl als erster ausgesprochen. Von seinen Schriften ist nichts mehr erhalten, und schon im 4. Jahrhundert vor Christus wurde seine Hypothese Demokrit zugeschrieben
- **Demokrit** (um 460 - 370 v. Chr.), ein reicher Thraker der selben Periode (wenn man reich war, ließ es sich schon in der Antike besser philosophieren), hat die Idee aufgegriffen und weitergeführt.
- **Galen**, eher bekannt als Arzt, zitiert aus den 72 verlorenen Büchern Demokrits etwa wie folgt: *"Denn nur durch Konvention (oder Übereinkunft, Gewöhnung) existiert Farbe; bitter und süß sind Konvention, doch die Realität besteht nur aus Atomen und Leere"*.
- In Demokrits Hypothese sind Atome alle aus dem gleichen "Stoff" gemacht (*heute würden wir sagen: Protonen, Neutronen und Elektronen*), doch unterscheiden sie sich nach Größe, Lage und Form. Sie können sich untereinander verbinden; damit konstituiert sich die gegenständliche Welt. Die Eigenschaften der Gegenstände werden bestimmt durch den "Zusammenhalt" der Teilchen (= *Moleküle oder Basis der Kristalle in moderner Lingo*). Die Entstehung der Welt ist - immer nach Demokrit - eine Folge der unablässigen Bewegung der Atome im Raum.

Nicht schlecht für einen 2500 Jahre alten Griechen!

- Die Gegenposition vertrat **Aristoteles** (384 - 322 v. Chr.) mit der "**vier Elemente Hypothese**", die wie das meiste (alles?), was der berühmte Philosoph zur "Physik" von sich gab, falsch war und einen deutlichen Rückschritt bedeutete.
- Da seine vielen Bücher aber nicht alle verloren gingen, hat er die abendländische Wissenschaft viele Jahrhunderte von der Erkenntnis der Wahrheit abhalten können; in manchen (nach eigener Meinung hochgebildeten, da lateinisch und (alt)griechisch sprechenden) Köpfen tut er das heute noch. Wahrheit oder Erfolg wird eben gelegentlich doch nach der Quantität, und nicht nach der Qualität des Geschriebenen gemessen

Merke:
Wer schreibt, der bleibt!
oder, in Englisch
Publish or Perish!

Mehr zu [alten Griechen](#) und der Atomhypothese im Link

Quellen:

- **Rhodes**, Richard; [The Making of the Atomic Bomb](#); Simon and Schuster, New York, 1988
- **Gates**, Bill; Encarta (hate to admit it).

Stickstoffgruppe (Hauptgruppe V)

Basics

Die Elemente der V Hauptgruppe haben wenig gemeinsam. Über Stickstoff und Phosphor muß nicht viel gesagt werden - die organische Chemie ist ohne diese Elemente kaum denkbar. Dazu kommt noch, daß **P** auch für die Halbleiterindustrie ein sehr wichtiges (Dotier)element ist, und Nitride zu den wichtigen Keramiken zählen.

Arsen und Antimon sind Halbmetalle, Bismut (früher Wismut) genannt, ist ein (Schwer)metall.

Anwendungen für **As** und Arsenik (**As₂O₃**) finden sich in Kriminalromanen, aber auch in der Halbleiter- und Glasindustrie.

Bi (und **Bi**-Verbindungen) haben eine ganze Reihe von interessanten elektronischen und magnetischen Eigenschaften; man findet es in so exotischen Produkten wie [Peltierelementen](#)

Tabellarische Datensammlung

Name (Englisch)	Stickstoff <i>Nitrogen</i>	Phosphor <i>Phosphorus</i>	Arsen <i>Arsenic</i>	Antimon <i>Antimony</i>	Bismut <i>Bismuth</i>
Ordnungszahl	7	15	33	51	83
rel. Atommasse [u]	14,01	30,97	74,92	121,75	208,98
Schmelzpunkt [K]	63,29	317,3	sublimiert	903,89	544,5
Schmelzpunkt [°C]	-209,71	44,3	-	630,89	271,5
Siedepunkt [K]	77,4	553	886	2023	1833
Dichte [g/cm ³]	1,17	1,82	5,72	6,69	9,80
Ionisierungsenergie [eV]	14,53	10,49	9,81	8,64	7,29
Elektronegativität	3,1	2,1	2,2	1,8	1,7
Atomradius [pm]	71	93	125	145	155
Ionenradius [pm]	171	44	69	89	96
Oxidationszahlen	5, 4, 3, 2, -3	5, 3, -3	5, 3, -3	5, 3, -3	5, 3
Gittertyp Umwandlungstemp. [°C]	hcp	op	r	r	r
Gitterkonstante [Å] (a or c)	?	?	4,14	4,50	4,74
E - Modul [GPa]	?	?	?	54,9	31,9
Therm. Ausdehnungskoeff. α [·10 ⁻⁶ K ⁻¹]	?	?	?	?	?

Die diversen Angaben beziehen sich im Zweifelsfall auf die Raumtemperaturkonfiguration.

fcc = face centered cubic = [kubisch flächenzentriert](#); Gitterkonst. = a

bcc = body centered cubic = kubisch raumzentriert

sc = simple cubic = kubisch-primitiv

hp = simple hexagonal = [hexagonal](#)

hcp = hexagonal close packed = hexagonale dichteste Kugelpackung; Gitterkonst. = c in Basisebene

op = simple orthorombic = [orthorhombisch](#), [monoklin](#), [triklin](#)

tp = simple tetragonal = [tetragonal](#)

dia = diamant strukture = [Diamantstruktur](#)

r = trigonal = [rhomboedrisch](#) trigonal

Anthropomorphe Begriffe in der Materialwissenschaft

Basics

- **Anthropomorphismus** (griechisch *anthropos*: Mensch; *morphein*: bilden, formen) ist die Vorstellung oder Unterstellung von menschlichen Eigenschaften und Verhaltensweise in der Natur. Bei den **alten Griechen** war es insbesondere die Übertragung menschlicher Züge auf die Götter und Göttinnen.

 - Wenn wir sagen, daß Atome "*gerne was tun wollen*", dann übertragen wir menschliche Begriffe auf unbelebte Dinge, wir verwenden anthropomorphe Begriffe.
- Obwohl das zur Zeit nicht als wissenschaftlich gilt, werden im Hyperskript öfter mal anthropomorphe Begriffe benutzt. Zum einen, weil es sich leichter liest und zum anderen, weil man sich dadurch manchmal die Dinge auch besser merken kann.

 - Puristen müssen sich mal fragen, wo exakt die Grenze ist. Die folgenden Formulierungen:
 - Atome wollen gerne gefüllte Schalen haben,
 - Atome streben gefüllte Schalen an,
 - Atome neigen zu gefüllten Schalen,
 - Atome senken ihre Energie falls sie gefüllte Schalen haben,
 - die Wahrscheinlichkeit der Aufnahme oder Abgabe eines Elektrons ist größer, falls das Atom dadurch seine äußere Schalen füllen kann,
 meinen inhaltlich immer dasselbe. Die Formulierung variiert aber von anthropomorph zu rein wissenschaftlich - ab wann ist sie "sauber"? Solange man die harten Fakten im Hinterkopf hat, sind alle Formulierungen gleich gut, die eher anthropomorphen aber kürzer und eingängiger.
- Außerdem stellt sich natürlich die Frage: Wieso darf der Mensch bewußt was wollen, seine Atome aber nicht?

 - Atome haben, so weit sind sich alle einig, keinen **freien Willen**. Das Gehirn aber, obwohl es aus Atomen besteht, "irgendwie" doch.
 - *Wir* merken es, am Rande gesagt, überhaupt nicht, daß die Atome, aus denen die Neuronen des Gehirns (und was sonst noch dazugehört) bestehen, im Mittel alle paar Wochen ausgewechselt werden. Wie entsteht Bewußtsein auf der Basis der Hardware, der Atome? Hier kommen wir in extrem tiefes Wasser; wer etwas weiter schwimmen will, sollte mal in die Bücher von Roger [Penrose](#) hineinschauen.

Wasserstoff (I Hauptgruppe):

- Die **Hauptgruppe IA** umfaßt die **Alkalimetalle** und **Wasserstoff**; der aber nicht zu den Alkalimetallen gerechnet wird sondern hier als Einzelfall behandelt wird.
- Wasserstoff ist das mit Abstand häufigste Element im Weltall. Das uns bekannte Weltall setzt sich zu $\approx 93\%$ aus Wasserstoff und zu $\approx 7\%$ aus Helium zusammen; für die restlichen Elemente bleiben gerade mal $\approx 0,1\%$ - grob geschätzt.
 - Die großen Planeten unseres Sonnensystems wie z.B. Jupiter und Saturn bestehen überwiegend aus Wasserstoff ; die Erde dagegen hat den kleinen Rest abgekliegt: nur ca. **0,12%** Wasserstoff.
 - In der Erdkruste aber ist Wasserstoff mit **2,88%** nach Sauerstoff (**60,43%**) und Silizium (**20,48%**) immerhin das dritthäufigste Element. Im menschlichen Körper hat es sogar einen Anteil von **60,56** Atomprozent.
 - Die Weltproduktion von Wasserstoff liegt derzeit bei ca. **$350 \cdot 10^9$ t** pro Jahr. Falls das Konzept der solaren Wasserstoffwirtschaft irgenvann greift, wird diese Zahl kräftig zulegen.

Tabellarische Datensammlung

Name (<i>Englisch</i>)	Wasserstoff <i>Hydrogen</i>
Ordnungszahl	1
Atommasse [u]	1 2 = Deuterium, 3 = Tritium
Schmelzpunkt [K]	14
Schmelzpunkt [°C]	-259
Siedepunkt [K]	20
Dichte [g/cm³]	$8,4 \cdot 10^{-5}$ (Rekord)
Ionisierungsenergie [eV]	
Elektronegativität	

Most architects think by the inch, talk by the yard, and should be kicked by the foot

Prince Charles

Das angelsächsische Längenmaß

Basics

Das **angelsächsische Längenmaß** (auch *angloamerikanisches* Längenmaß genannt) ist längst durch das metrische System abgelöst worden - aber die Angelsachsen haben das noch nicht gemerkt, und es ist nach wie vor sehr weit verbreitet.

- In den Vereinigten Staaten von Amerika, in England und in den ehemaligen Kolonien des britischen Commonwealth, ist dieses System immer noch im Gebrauch, obwohl es außerordentlich kompliziert und schwerfällig ist.
- Das hat natürlich Gründe, einer dieser Gründe ist so *total verrückt*, daß es sich lohnt, dafür ein [eigenes Modul](#) zu haben.

Für jemanden, der das **metrische System** gewöhnt ist, erscheint das angelsächsische System überaus verwirrend, unlogisch und gewöhnungsbedürftig. Das liegt daran, daß es überaus verwirrend, unlogisch und gewöhnungsbedürftig *ist*.

- Aber was soll's. [Flugzeugabstürze](#), [Satellitenversagen](#), allgemeine Schäden in Milliardenhöhe, verursacht durch mangelnden Durchblick bei Längeneinheiten, haben bisher nicht vermocht, die Angelsachsen von ihrem antiquitierten Maßsystem abzubringen. Wir müssen wohl alle damit leben. Daß es natürlich auch Vorteile hat zeigt obiges Zitat - auf metrisch wär's nicht möglich.

Die Einheit Yard wird nicht nur in der angelsächsischen Wissenschaft verwendet, sondern es ist auch seit Beginn das traditionelle Längenmaß für etliche Sportarten, wie zum Beispiel American Football, Golf oder auch Cricket, um nur ein paar wenige zu nennen.

- Nicht jedoch bei den Glasbläsern - das sei als Kuriosität am Rande vermerkt. Die sind auch bei den Angelsachsen "schon immer" metrisch (so wie "unsere" Installateure lange "zöllisch" waren oder sogar noch sind).

Eine Besonderheit des angelsächsischen Systems ist, daß neben den *Dezimalfraktionen* (z.B. **0,25 in = 2,5"**), auch die Zweierbrüche (**1/2, 1/4**, bis zum **1/32**) verwendet werden. Man schreibt statt **0,125"** dann **1/8"**

- Wer jemals versucht hat, z.B. ein Gewinde im angelsächsischen Maßsystem zu produzieren, wundert sich nicht mehr, warum öfter mal was schief geht, sondern eher wie die Amis es *trotzdem* schafften, einen Mann auf den Mond zu bringen. (Inzwischen bezweifeln ja über **20%** der Amis, das sie das tatsächlich getan haben - man gebe mal "moon hoax" in Google ein - aber halt für die falschen Gründe).

Umrechnungstabelle

Angelsächsisch				Metrisch
1 inch (in , auch ")	=			2,54 cm
1 milli inch (mill)	=	0,001 in	=	0,0254 cm
1 foot (ft , auch ')	=	12 in	=	0,3048 m
1 yard (yd)	=	3 ft	=	0,9144 m
1 fathom	=	2 yd	=	1,8288 m
1 rod	=	5,5 yd	=	5,0292 m
1 chain	=	4 rod	=	20,1168 m
1 furlong	=	10 chain	=	201,168 m
1 mile	=	80 furlong	=	1609,344 m
1 nautical mile	=	1 n mile	=	1852 m


Beispiel

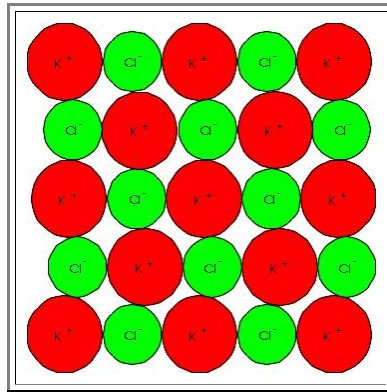
- Ein Mensch ist beispielsweise **1,88 m** groß. In Fuß und Inch gerechnet ist dieser Mensch dann circa **6 Fuß** und **2 Inch** groß. Die korrekte Schreibweise wäre hierfür **6' 2"**.
- Übrigens wird die Größe eines Menschen **nie** in **Yard** gerechnet. Die Rechnung in Metern könnte leicht dazu verleiten.
- Eine weitere angelsächsische Eigenheit, die bei Umrechnungen gern zu erheblichen Fehlern führt (exakt den Faktor **1000**), liegt in der Auslassung der **Milliarde** beim Zählen.
 - Nach der "**million**" (**10^6**) folgt gleich die "**billion**" (**10^9**), gefolgt von der "**trillion**" (**10^{12}**) und der **quatrillion** (**10^{15}**), die der deutschen **Billion** bzw. **Trillion** entsprechen.
 - Eine genaue Übersicht gibt es im Link
- Die Zahl der Übersetzungsfehler ist Legion, vor allem beim Geld (Staatshaushalt etc.).
 - Der deutsche oder amerikanische Journalist wird es fast immer falsch machen. Merken tut es in der Regel keiner, denn ob ein Staatsdefizit **\$ 1500 billion** oder **€1500 Billionen** beträgt, ist für die (nach eigener Meinung) gebildeten deutschen (und amerikanischen) Eliten sowieso ungefähr dasselbe: Einfach **viel**.

Bis kurz vorm Mars war noch alles in Ordnung. Doch dann passierte das Unglück: Statt eine stabile Umlaufbahn einzunehmen, kam der **Mars Climate Orbiter** dem roten Planeten zu nahe und verglühte in seiner Atmosphäre. Das war im September **1999**. Sofort begann eine fieberhafte Suche nach der Ursache für den Fehler. Das Ergebnis war kaum zu glauben: Die beiden NASA-Kontrollzentren in Denver und Pasadena hatten mit unterschiedlichen Maßeinheiten gerechnet: das eine Team in **Metern und Kilogramm**, das andere in **Foot und Pound** - über ein Jahrhundert, nachdem sich die USA und **16** andere Staaten darauf geeinigt hatten, künftig nur noch das metrische System zu verwenden - und **40** Jahre, nachdem nahezu weltweit die (auf dem metrischen System beruhenden) **SI**-Einheiten eingeführt waren.

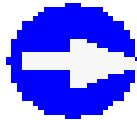
Ungefähr **1980**, mußte eine kanadische **Boeing** notlanden - was gerade noch im Segelflug gelang - weil der Treibstoffvorratsanzeiger ausgefallen war, und ein Techniker beim letzten Zwischenstop dann mit einem Peilstab den Inhalt der Flügeltanks abgelesen hatte. Der Peilstab war in **Litern** geeicht, weitergegeben wurde die Zahl aber als **Gallons**. Mitten im Flug ging der Treibstoff aus - shit happens, wie die Amerikaner sagen, aber notwendig war's nicht. Wie durch ein Wunder konnte der Jet als Segelflugzeug noch ohne Personenschäden landen.

Zu Übung 2.2-3: Hier sieht man den Kristall zweidimensional.

 Hier sit eien (leicht wackelige) zweidimensionale Darstellung des **KCl**-Kristalls:



HTML-Version von: Christian Rieck und Holmer Denks, erstellt im Februar 1999



[Zum dreidimensionalen Kristall](#)



[Zurück zur Aufgabenlösung](#)

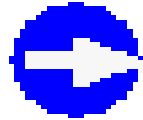
Übung 2-7: Hier sieht man den Kristall dreidimensional.

Um ihn von einer anderen Seite zu betrachten, bewege man ihn mit der Maus!

HTML-Version von: Christian Rieck und Holmer Denks, erstellt im Februar 1999



[Zum zweidimensionale Kristall](#)

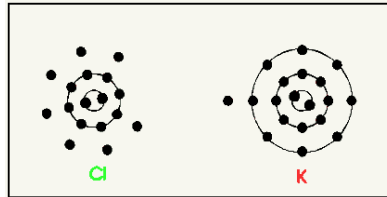


[Zurück zur Aufgabenlösung](#)

Hier sieht man das Elektron hüpfen!

- Durch die Ionisation treten Kräfte auf, die zu einer Annäherung der beiden Atome führen.
- Sobald das Elektron "gehüpft" ist, nähern sich die beiden Ionen sehr schnell bis zum Bindungsabstand.
- Man muß schnell schauen, um das zu sehen!
- Das ganze ist natürlich nicht ernst gemeint!

Illustration



HTML-Version von: Christian Rieck und Holmer Denks, erstellt im Februar 1999



[Zurück zur Aufgabe](#)

Multiple Choice Test zu

2.1.1 Atome - Ausgangspunkt

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1.2 Frühe Atommodelle

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1.3 Schrödingergleichung und Wasserstoffatom

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1.4 Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1.5 Lösung der Schrödingergleichung und Aufbau aller Atome

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1.6 Das Atom und die Chemie

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.1 Quantentheorie der Atome

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2.1 Ionenbindung

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2.2 Vom Molekül zum Kristall

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2.3 Vom Molekül zum Kristall

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2.4 Restliche Bindung

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2 Bindungen

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.3.1 Bindung und Potentialtopf

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.4 Ableitung von Materialparametern aus den Bindungspotentialen

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

Kapitel 2: Vom Atom zum Festkörper

Start Multiple Choice

Übung 2.1-1

Wie klein sind Atome?

2500 Jahre nach [Demokrit](#) ist es immer noch anregend, sich folgende Fragen zu beantworten

1. Wie oft (in etwa) müssen Sie die Gedankenoperation ausführen, die Demokrit vor ca. **2500** Jahren begann, um durch wiederholtes Teilen eines Würfels mit **1 cm** Kantenlänge nur noch **ein** Atom übrig zu haben?
2. Wie groß müsste ein Atommodell sein, bei dem der Atomkern ca. **1 cm** durchmisst?
3. Wieviele Atome passen in einen Würfel mit der Kantenlänge **10 nm** oder **100 nm**? Wieviele dieser Atome (in %) sitzen auf der Oberfläche?
4. Wieviel **Fe** - Atome auf der Oberfläche eines quadratischen **Si** - Kristalls (Kantenlänge **1 cm** und Dicke **1 mm**; ein Stück eines Wafers für die Mikroelektronik) reichen aus, um nach Eindiffusion ins Volumen (gleichförmige Verteilung angenommen), die kritische (für Chips) Konzentration von ca. **10^{12} cm^{-3}** zu erreichen? Wie groß ist diese Konzentration in % der Konzentration der **Si** - Atome an der Oberfläche (in **cm^{-2}**).

Hochauflösende Bilder der Elektronenmikroskopie sind typischerweise **18 cm x 14 cm** groß und zeigen Atomreihen (senkrecht zur Bildebene) die als verschwommene Punkte mit Durchmessern von ca. **1 mm** erscheinen, wobei alle Atome, die in einer Säule von ca. **30 nm** Dicke stecken, aufeinander projiziert werden - ein Beispiel ist im [Link](#) zu sehen. An den ca. **500** Mikroskopen die seit ca. **15** Jahren im weltweiten Einsatz sind, werden täglich ca. **10** Bilder produziert.

5. Wieviel Atome wurden - ganz grob - damit weltweit bisher angeschaut?
6. Wie groß ist damit das bisher untersuchte Volumen aller betrachteten Materialien?



Lösung

Übung 2.1-2

Folgerungen aus der Bohrschen Quantenbedingung

1. Zeige, daß die Gleichung für die erlaubten Radien der Elektronenbahn aus den [gegebenen zwei Gleichungen](#) resultiert.
2. Berechne *potentielle*, *kinetische* und *Gesamtenergie* des Elektrons als Funktion der Quantenzahl.
 - Zeige, daß folgende Beziehung gilt. Beachte die Vorzeichen!

$$|E_{\text{pot}}| = 2E_{\text{kin}}$$

- *Hinweis:* Die Formel für das Kräftegleichgewicht ist leicht so umzuschreiben, daß auf einer Seite eine kinetische Energie steht. Berechne die zugehörige potentielle Energie durch Integration der Coulombkraft und vergleiche.
 - Berechne damit auch die Gesamtenergie.
3. Berechne die *Umlauffrequenz* ν als Funktion von n .
 4. Berechne die *Energiedifferenz* zwischen zwei Bahnen mit den Quantenzahlen n und n' .



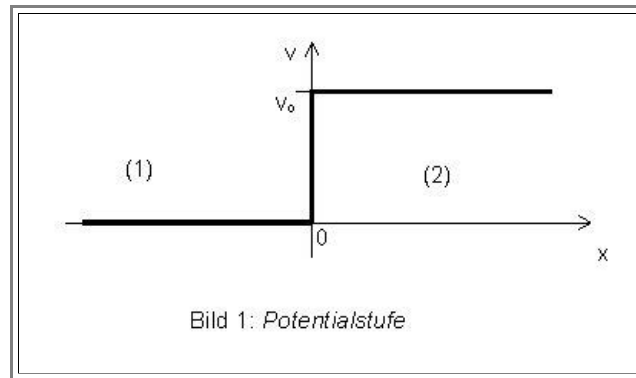
Lösung

Übung 2.1-5

Lösung der Schrödingergleichung für eine Potentialstufe

Wir betrachten ein Teilchen, das sich in dem dargestellten Potential eindimensional bewegt. Das Teilchen habe eine Gesamtenergie E , für die gelten soll: $E < V_0$.

- Das ist eine wichtige Beschränkung! Ein *klassisches* Teilchen kann sich deshalb *nur* im Bereich (1) aufhalten. Wenn das nicht glasklar ist, unbedingt darüber nachdenken!
- Die Potentialstufe sieht also so aus:



- Links ist das Potential - also die potentielle Energie des Teilchens - Null, rechts hat es den endlichen Wert V_0
- Wir fragen uns im wesentlichen, was einem Teilchen passiert das sich im Bereich (1) aufhält, wenn es auf die Potentialschwelle trifft.

Fragen:

- Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet (1)?
- Zeige, daß $\psi_1(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (1) ist. A und B sind von 0 verschiedene Konstanten, und i ist die imaginäre Einheit; $i^2 = -1$.
- Was wird durch k physikalisch beschrieben? *Hinweis:* Beachte die *Dimension* und die allgemeine Form der Lösung (verwende den [Eulerschen Satz](#)).
- Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet (2)?
- Zeige, daß $\psi_2(x) = C \cdot \exp(-\alpha \cdot x)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (2) ist. C ist wieder eine von null verschiedene Konstante.
- Weiterhin gilt:

$$\alpha^2 = \frac{2m \cdot (V_0 - E)}{\hbar^2}$$

- Berechne die [Aufenthaltswahrscheinlichkeit](#) $|\psi_2(x)|^2$ des Teilchens in Gebiet (2) und vergleiche das Ergebnis mit deiner Erwartung für ein *klassisches* (nicht quantenmechanisches) Teilchen?
- Was könnte passieren, wenn statt einer Potentialschwelle eine dünne Barriere genommen wird?
- Warum macht die Lösung $\psi_1'(x) = C \cdot \exp(-\alpha \cdot x)$ für Gebiet (1) physikalisch keinen Sinn?
- Welcher Grenzfall führt bei diesem Problem auf das klassische Ergebnis?



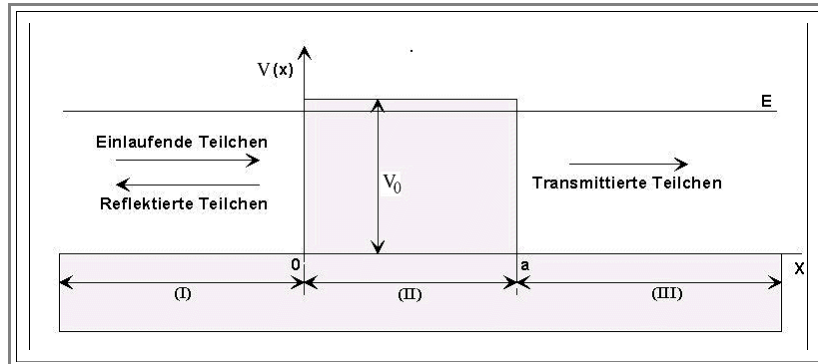
Lösung

Übung 2.1-7

Tunneleffekt

Man betrachte ein Teilchen mit der Energie $E < E_0$, das sich in dem unten dargestellten Potential (Potentialbarriere) von links kommend bewegt.

- Das ist schlicht eine erweiterte Form der [Übungsaufgabe 2.1-5](#).
- Das Potential ist definiert durch: $V = 0$ in Gebiet (I), $V = V_0$ in Gebiet (II) und $V = 0$ in Gebiet (III)



Fragen:

- 1. Wie verhält sich ein klassisches Teilchen in diesem Potential?

Es soll nun hergeleitet werden, wie sich das Teilchen verhält, wenn man es **quantenmechanisch** beschreibt. Wie man bereits bei der Potentialstufe gesehen hat, sind Teilchen in der Quantenmechanik in der Lage, etwas in klassisch verbotene Bereiche einzudringen. Daher muß man damit rechnen, daß das Teilchen auch in das Gebiet hinter der Barriere dringen kann.

- 2. Wie lautet die Schrödinger-Gleichung eines Teilchens in Gebiet (I)?
- 3. Man zeige, daß $\psi_1(x) = A \cdot \exp(+ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (I) ist. Dabei gilt $k = (2mE)^{1/2}/\hbar = \text{Wellenvektor}$.
- 4. Die Schrödinger-Gleichung in Gebiet (II) lautet

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2 = 0$$

- Eine allgemeine Lösung dieser Gleichung ist:
 $\psi_2(x) = C \cdot \exp -(\kappa \cdot x) + D \cdot \exp +(\kappa \cdot x)$. Welchen Wert nimmt der [Wellenvektor](#) κ in diesem Gebiet an?
- 5. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (III) lautet:
 $\psi_3(x) = F \cdot \exp + (ikx)$
mit dem Wellenvektor
 $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$
wie zuvor.
- Warum macht eine Lösung der Form
 $\psi_3(x) = F \cdot \exp - (i\kappa \cdot x) + G \cdot \exp + (i\kappa \cdot x)$
physikalisch keinen Sinn?
- 6. Um den Zusammenhang der Konstanten A , B , C , D und F zu ermitteln muß man welche Bedingungen verwenden?
- 7. Für den hier betrachteten Fall eines von links einlaufenden Teilchens kann man folgenden Zusammenhang zwischen den Konstanten A , B und F ermitteln:
- $A = F \cdot \cosh(2\kappa a) + i \cdot \delta \cdot 2 \sinh(2\kappa a) \cdot \exp(2i\kappa a)$
und
 $B = -F \cdot i \cdot \eta \cdot 2 \sinh(2\kappa a)$.
Dabei gilt:
 $\delta = \kappa k - \kappa \kappa$ und
 $\eta = \kappa k + \kappa \kappa$.





Lösung

Übung 2.2-1


Bindungsenergie



Einfache Integrale ausrechnen

 In dieser Übung sollen mit den Energieänderungen bei der Bildung einer Ionenbindung errechnet werden.

-  Dies soll am Beispiel des Kaliumchlorids geschehen. Wir gehen davon aus, daß wir je ein Kalium- und ein Chloratom haben, die zu einem Ionenpaar werden sollen. Dazu benötigen wir zunächst ein paar Daten:

	Kalium	Chlor
Ladung des Ions	+e	-e
Atomradius	133 pm	181 pm

-  Aus den Daten dieser Tabelle soll nun die Bindungsenergie des Ionenpaars Kalium-Chlor in Elektronenvolt (**eV**) und in Joule (**J**) bestimmt werden.

	Lösungshilfe
	Lösung

Übung 2.2-3

Darstellung von Ionenbindungen mit dem Schalenmodell

Wie für **NaCl** schon dargestellt, ist die Darstellung von Ionen-Bindungen über Schalenbilder sehr einfach. Ein weiteres Beispiel, wo dieses Modell gut anwendbar ist, ist **KCl**.

- Welche Schalen sind mit wievielen Elektronen besetzt und welcher Zustand ist aus energetischen Gründen wünschenswert?
- Zeichnen Sie die Schalenbilder!
- Zeichnen Sie die Schalenbilder der Ionen!
- Zeichnen Sie einen einfachen zweidimensionalen KCl-Kristall!
- *Sie haben noch nie ein Elektron hüpfen sehen?*
Hier dürfen Sie Augenzeuge werden!

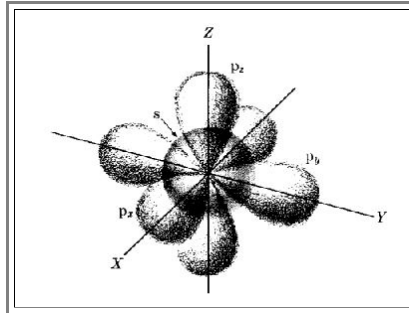


Lösung

Übung 2.2-4

C und Si Verbindungen mit und ohne Hybridisierung

Ohne Hybridisierung müssen wir **C**- oder **Si** - Atome zusammenfügen, deren Bindungsarme (die **p** - Orbitale) [so aussehen](#)



Zwei der **6 "p-Arme"** können Bindungen eingehen, jedoch nicht gegenüberliegende Keulen

Welche Bindungen zwischen mehreren solchen Gebilden sind möglich?

Was erhält man für **sp¹**, **sp²** oder **sp³** Hybridisierung?

Die grundsätzliche Struktur für die verschiedenen Hybridisierung findet sich im [Link](#).

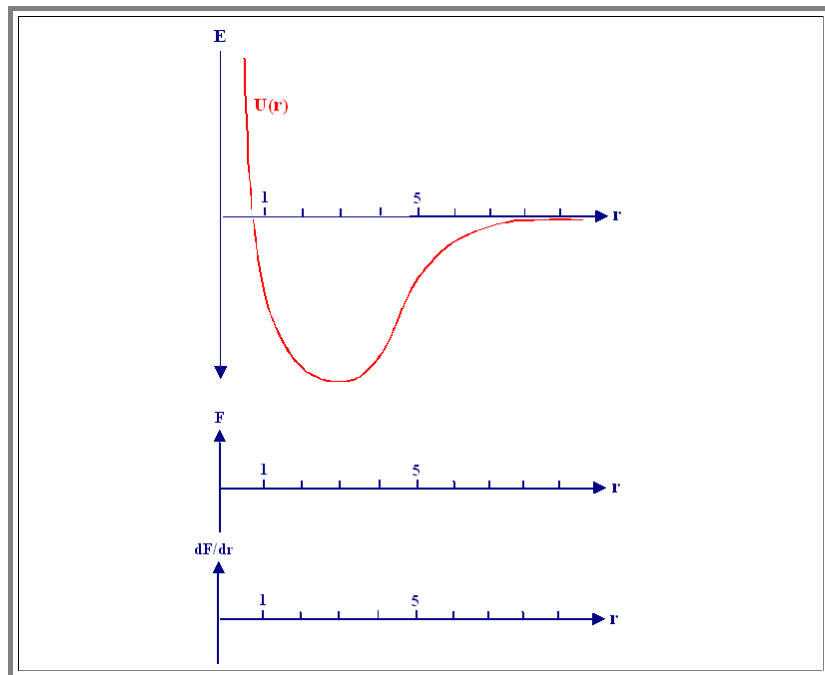
Was geht? Was geht nicht? Warum kann man nur mit Hybridisierung "ordentliche" Kristalle bilden?

Lösung

Übung 2.3-1

Potentialtopf und Kräfte

Gegeben sei ein Potentialtopf der etwa so aussieht (die Zahlen für r sind willkürlich):



Übertragen Sie die Zeichnung auf Papier (Mehr Platz lassen für F und dF/dr) und beantworten Sie (ggf. durch Einzeichnen) folgende Fragen

- Wo liegt r_0 ?
- Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)
- Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das 2. Diagramm unterhalb einzeichnen)
- Wie müsste die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?
- Wie sieht die 2. Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?



Lösung

Übung 2.4-1

Berechnung des E-Moduls aus dem Bindungspotential

Gegeben sei das Bindungspotential

$$U_{\text{Bindg}} = - \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

1. Wie groß ist der Elastizitätsmodul ausgedrückt in U_{Bindg} ? Für [Hinweise zur Ableitung der Grundformel](#) siehe den Hauptstrang.
2. Zeige, daß man folgendes Ergebnis erhält:

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

- Dabei wurde A und B in der Grundformel durch den Bindungsabstand r_0 und die Bindungsenergie U_0 substituiert.

Hinweis: Für die beiden Parameter A und B sollte sich folgende Beziehung ergeben:

$$A = U_0 \cdot r_0^n \cdot \frac{m}{m-n}$$

$$B = -U_0 \cdot r_0^m \cdot \frac{n}{m-n}$$



Lösung

Zu Übung 2.2-3: Die Elektronenkonfiguration



Hier ist die Tabelle für **K** und **Cl**

	Kalium		Chlor	
	Anzahl der Elektronen	Zustand	Anzahl der Elektronen	Zustand
1. Schale	2	voll	2	voll
2. Schale	8	voll	8	voll
3. Schale	8	voll	7	fast voll
4. Schale	1	fast leer	0	leer

HTML-Version von: Christian Rieck und Holmer Denks, erstellt im Februar 1999

Lösungen zur Übung 2.1-1:

Wie groß sind Atome?

Illustration

1. Wie oft muß man die Demokritsche Gedankenoperation ausführen?

- Man müßte die Gedankenoperation etwa 80-mal ausführen, denn:
- Da ein Atom einen Durchmesser von ca. 10^{-10} m hat, müßte man ca. 10^8 Atome aneinanderreihen, um eine Kette von 1 cm Länge zu erhalten. Für einen massiven Würfel mit einer Kantenlänge von 1 cm benötigt man also ca. 10^{24} Atome. Von einem Atom ausgehend, gilt für die Anzahl N der Schritte, mit der wir die Atomanzahl verdoppeln müssen, um den gesamten Würfel aufzubauen:
- $2^N = 10^{24}$ oder
 $N = 24 \ln(10) / \ln(2) = 79,73$

2. Wie groß müßte ein Atommodell sein, bei dem der Atomkern ca. 1 cm durchmißt?

- Das Atommodell müßte einen Durchmesser D von 1 km haben, denn das Verhältnis von Atomdurchmesser zu Atomkerndurchmesser beträgt:
- 10^{-10} m : 10^{-15} m = 10^3 m : 10^{-2} m.

3. Wieviele Atome passen in einen Würfel mit der Kantenlänge 10 nm oder 100 nm?

- Kantenlänge 10 nm:**
Volumen des Würfels: $V_W = (10 \text{ nm})^3 = 10^{-24} \text{ m}^3$
Volumen eines Atoms: $V_A = (4/3) \cdot \pi \cdot r^3$,
mit $r = 1/2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
 $V_A = 4/3 \cdot 1/8 \cdot \pi \cdot 10^{-30} \text{ m}^3 = 5,23 \cdot 10^{-31} \text{ m}^3 = 5,23 \cdot 10^{-22} \text{ mm}^3$
- Da Atome nicht eckig sind und somit ein gegebenes Volumen wie einen Würfel nicht vollständig ausfüllen, ist die Packungsdichte P , die von der jeweiligen Kristallstruktur bestimmt wird, mit zu berücksichtigen. Hierbei gilt:
 P = Volumen der Atome im Würfel/Würfelvolumen
- Wir erhalten damit für die gesuchte Zahl N
 $N \cdot V_A = P \cdot V_W$, oder
 $N = P \cdot V_W / V_A$, mit dem Ergebnis
- | | |
|--|---|
| $N = 1,9 \cdot 10^6$ für $P = 100\%$ (Eigentlich unmöglich, da Atome nicht eckig...)
$N = 1,4 \cdot 10^6$ für $P = 74\%$ (Kubisch flächenzentriert)
$N = 1,3 \cdot 10^6$ für $P = 68\%$ (Kubisch raumzentriert)
$N = 0,99 \cdot 10^6$ für $P = 52\%$ (Kubisch primitiv) |) Was das bedeutet
lernen wir in Kapitel 3 |
|--|---|
- ziemlich viel Atome für so ein kleines Volumen!
- Bei einer Kantenlänge von 100 nm erhalten wir dieselben Werte multipliziert mit 1 000, denn das Würfelvolumen ist jetzt 1000 mal größer.

4. Wieviel Fe - Atome auf der Oberfläche eines quadratischen Si - Kristalls (Kantenlänge 1 cm und Dicke 1 mm; das ist ein Stück eines Wafers für die Mikroelektronik) reichen aus, um nach Eindiffusion ins Volumen (gleichförmige Verteilung angenommen), die kritische (für Chips) Konzentration von ca. 10^{12} cm^{-3} zu erreichen? Wie groß ist diese Konzentration in % der Konzentration der Si - Atome an der Oberfläche (in cm^{-2})?

- Berechnung der Anzahl der benötigten Eisenatome:**
Volumen des Si-Kristalls: $V_{\text{Si}} = 0,1 \text{ cm}^3$
Die kritische Konzentration ist $K_{\text{crit}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, daraus folgt für die Zahl der Eisenatome N_{Fe}
 $N_{\text{Fe}} / V_{\text{Si}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, oder
 $N_{\text{Fe}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3} \cdot 0,1 \text{ cm}^3 = 10^{11}$
Somit reichen 10^{11} Eisenatome aus, um die kritische Konzentration zu erreichen.
- Berechnung der Oberflächenkonzentrationen:**
Oberfläche O des Si-Kristalls:
 $O = 2 \text{ cm}^2$.
Die Oberflächendichte D_{Fe} der Eisenatome beträgt somit:
 $D_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe}} / O = 10^{11} / 2 \text{ cm}^2 = 5 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$.

- Da die Gitterkonstante von Silizium $a = 0,543 \text{ nm}$ beträgt, und Silizium eine 2-atomige Basis aufweist, sitzt auf der Oberfläche O des Kristalls folgende Anzahl N_{Si} an Si-Atomen:

$$N_{\text{Si}} = 2 \cdot (O/a^2)$$

$$= 4 \text{ cm}^2 / (0,543 \text{ nm})^2$$

$$N_{\text{Si}} = 13,5 \cdot 10^{14}$$

- Die Oberflächendichte D_{Si} der Siliziumatome beträgt somit:

$$D_{\text{Si}} = N_{\text{Si}}/O = 6,7 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$$

- Es ergibt sich an der Oberfläche des Kristalls also folgendes Verhältnis G von Eisen- zu Siliziumatomen:

$$G \approx (N_{\text{Fe}}/N_{\text{Si}}) \text{ oder}$$

$$G \approx 7,4 \cdot 10^{-5} = 0,0074 \%$$

Das heißt: Falls nur **0,0074%** aller Oberflächenatome aus Eisen sind, ist der Chip anschließend kaputt.

- 5. Hochauflösende** Bilder der Elektronenmikroskopie sind typischerweise **18 cm x 14cm** groß und zeigen Atomreihen (senkrecht zur Bildebene) die als verschwommene Punkte mit Durchmessern von ca **1 mm** erscheinen, wobei alle Atome, die in einer Säule von ca. **30 nm** Dicke stecken, aufeinander projiziert werden - ein Beispiel ist im [Link](#) zu sehen. An den ca. **500** Mikroskopen die seit ca. **15** Jahren im weltweiten Einsatz sind, werden täglich ca. **10** Bilder produziert.

- Wieviel Atome wurden - ganz grob - damit weltweit bisher angeschaut?

- Ganz grob (d.h. ohne Berücksichtigung der Packungsdichte) wurden damit weltweit bisher **$2,57 \cdot 10^{14}$** Atome angeschaut, denn

$$N = 15 \cdot 356 \cdot 10 \cdot 500 \cdot (30 \text{ nm}/10^{-10} \text{ m}) \cdot [18 \text{ cm} \cdot 14 \text{ cm}] / (\pi(1/2 \text{ mm})^2)$$

$$N = 15 \cdot 356 \cdot 10 \cdot 500 \cdot (3 \cdot 10^{-8} \text{ m}/10^{-10} \text{ m}) \cdot (18 \cdot 10^{-2} \text{ m} \cdot 14 \cdot 10^{-2} \text{ m}) / [(\pi \cdot (1/4) \cdot 10^{-6} \text{ m}^2)]$$

$$N = 2,57 \cdot 10^{14}$$

- 6.** Wie groß ist damit das bisher mit Elektronenmikroskopen untersuchte Volumen aller betrachteten Materialien?

- Das Volumen [eines Atoms](#) ist etwa **$1/6\pi \cdot 10^{-30} \text{ m}^3 = 5,23 \cdot 10^{-22} \text{ mm}^3$** .

- Das gesamte mit **Hochauflösung** untersuchte Volumen beläuft sich damit auf **$V = 2,57 \cdot 10^{14} \cdot 5,23 \cdot 10^{-22} \text{ mm}^3 = 13,44 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^3 = 134,4 \mu\text{m}^3$** .

- Das ist nicht übertrieben viel, wenn man bedenkt welche allgemeinen Schlüsse Elektronenmikroskopiker aus ihren Beobachtungen gerne ziehen! Auch das mit kleinerer Auflösung untersuchte Volumen ist nicht besonders groß; es liegt im **cm³** Bereich.

- PS:** Zu recht heißt es:

- "Die schärfsten Kritiker der Elche waren früher selber welche"**
(Robert **Gernhardt**)

- Ich war auch mal Elektronenmikroskopiker.

Lösungen zur Übung 2.2-1:

Folgerungen aus der Bohrschen Quantenbedingung

Illustration

1. Zeige, daß die Gleichung für die erlaubten Radien der Elektronenbahn aus den [gegebenen zwei Gleichungen](#) resultiert.:

Aus

$$mvr = n \cdot \hbar$$

folgt durch Umsellen

$$v = \frac{n \cdot \hbar}{m \cdot r}$$

Einsetzen in die Kräftegleichgewichtsformel $ze^2/4\pi\epsilon_0 r^2 = mv^2/r$ gibt direkt

$$r_n = \frac{n^2 \cdot \hbar^2 \cdot \epsilon_0}{z \cdot \pi \cdot e^2 \cdot m}$$

2. Berechne *potentielle*, *kinetische* und *Gesamtenergie* des Elektrons als Funktion der Quantenzahl:

Multipliziert man die Kräftegleichgewichtsformel mit r , erhält man

$$\frac{z \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} = m \cdot v^2 = 2E_{\text{kin}}$$

Die rechte Seite ist also die doppelte kinetische Energie des Systems.

Die potentielle Energie entspricht der Arbeit, die man gewinnt, falls man das Elektron aus dem Unendlichen zur Position r bringt. Wir haben also

$$E_{\text{pot}} = \int_{\infty}^r \frac{z \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r'^2} \cdot dr' = - \frac{z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r}$$

Das ist genau die rechte Seite der obigen Gleichung.

Damit gilt

$$|E_{\text{pot}}| = 2E_{\text{kin}} \quad \text{q.e.d.}$$

$$E_{\text{ges}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = -E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2}mv^2$$

Die potentielle Energie muß vorzeichenrichtig, d.h. mit dem Minuszeichen eingesetzt werden. Die Gesamtenergie ist dann, wie es sein muß, *negativ*, d.h. das Elektron ist *gebunden*.

Mit der Formel für die Geschwindigkeit von oben ergibt sich

$$E_{\text{ges}} = - \frac{m \cdot (n \cdot h)^2}{2 \cdot (2\pi \cdot m \cdot r)^2} = - \frac{n^2 \cdot h^2}{8m \cdot \pi^2 \cdot r^2}$$

- Setzen wir noch r von oben ein, haben wir

$$E_{\text{ges}} = - \frac{n^2 \cdot h^2}{8m \cdot \pi^2} \cdot \frac{\pi^2 \cdot e^4 \cdot m^2}{n^4 \cdot h^4 \cdot \epsilon_0^2} = \frac{m \cdot e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

3. Berechne die **Umlauffrequenz** ν als Funktion von n :

- Die Umlauffrequenz ν ist der Kehrwert der Umlaufzeit $t_u = 2\pi r/\nu$, wir haben also mit den Ausdrücken für ν und r von oben

$$\nu = \frac{\nu}{2\pi \cdot r} = \frac{m \cdot e^4}{4 \cdot h^3 \cdot \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^3}$$

4. Berechne die **Energiedifferenz** zwischen zwei Bahnen mit den Quantenzahlen n und m :

- Die Energiedifferenz $\Delta E_{n,m}$ zu den Quantenzahl n und n' ist

$$\Delta E_{n,m} = \frac{m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

Lösungen zur Übung 2.2-5

Lösung der Schrödinger-Gleichung für eine Potentialstufe

Illustration

1. Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet (1)?

Da hier $V(x) = 0$ ist, wird die eindimensionale [Schrödinger-Gleichung](#) des Teilchens in Gebiet (1) einfach

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi_1 = 0$$

2. Zeige, daß $\psi_1(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (1) ist.

A und B sind von 0 verschiedene Konstanten, und i ist die imaginäre Einheit; $i^2 = -1$.

Zweifaches Ableiten dieser Wellenfunktion liefert:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-ikx) \\ \frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} &= -k^2 \cdot A \cdot \exp(ikx) - k^2 \cdot B \cdot \exp(-ikx) \\ &= -k^2 \cdot \psi_1(x) \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis wird in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Wir erhalten dann das folgende Resultat:

$$\begin{aligned} -k^2 \cdot \psi_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi_1(x) &= 0 \\ -k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E &= 0 \end{aligned}$$

Das ist eine Bedingung für die Größe k . Der gemachte Ansatz ist also *nur dann* eine Lösung falls gilt:

$$\begin{aligned} k &= \pm \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \right)^{1/2} = \frac{(2m \cdot E)^{1/2}}{\hbar} = \frac{(m^2 \cdot v^2)^{1/2}}{\hbar} \\ k &= \frac{p}{\hbar} := \frac{2\pi}{\lambda} \end{aligned}$$

Dabei haben wir von folgenden Beziehungen Gebrauch gemacht:

- Die Gesamtenergie *muß* ausschließlich kinetisch sein - das Potential ist ja $= 0$ - also gilt $E = \frac{1}{2}mv^2$.
- Der durch Einsetzen erhaltene Ausdruck m^2v^2 ist natürlich das Quadrat des Impulses p .
- Die [de Broglie Beziehung](#) sagt uns, daß $p/\hbar = 2\pi/\lambda$, das ergibt die letzte Gleichung.

Damit können wir die Zusatzfrage angehen:

Was wird durch k physikalisch beschrieben? *Hinweis:* Beachte die *Dimension* und die allgemeine Form der Lösung (verwende den [Eulerschen Satz](#)).

- ψ₁(**x**) löst die Schrödingergleichung für geeignet gewählte Parameter. Schreibt man die komplexen Exponentialfunktionen mit Hilfe der Eulerschen Beziehung aus, ergibt sich eine Folge von **sin** und **cos** Funktionen mit dem Argument **k · x**.
- Wie auch immer es genau aussieht, das ist etwas wellenartiges, und **k** ist bis auf das 2π so etwas wie die Wellenzahl 1/λ, weiter bis auf das ħ der Impuls **p = mv** - und sogar die Energie **E** steckt codiert in **k**.
 - Es ist schlicht die beherrschende Größe, in der alle Eigenschaften des Teilchens stecken!
 - In drei Dimensionen ist **k** ein **Vektor**, man nennt es den **Wellenvektor** des Teilchens; mit ihm haben wir einen zentralen Begriff der Quantentheorie kennengelernt.

3. Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für das Teilchen in Gebiet (2)?

- In Gebiet (2) gilt **V(x) = V₀**. Die Lösung der Schrödingergleichung des Teilchens lautet hier also:

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2 = 0$$

4. Zeige, daß ψ₂(**x**) = **C · exp** –(α · **x**) eine Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (2) ist.

- C** ist wieder eine von null verschiedene Konstante und für α gilt, wie sich gleich zeigen wird:

$$\alpha^2 = \frac{2m \cdot (V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Zweifaches Ableiten der vorgeschlagenen Wellenfunktion ψ₂(**x**) = **C · exp** –(α · **x**) liefert hier:

$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= C \cdot \exp(-\alpha x) \\ \frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} &= \alpha^2 \cdot C \cdot \exp(-\alpha x) \\ &= \alpha^2 \cdot \psi_2(x) \end{aligned}$$

- Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung für Gebiet (2) führt dann auf:

$$\begin{aligned} \alpha^2 \psi_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V_0) \cdot \psi_2(x) &= 0 \\ \alpha^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \end{aligned}$$

- q.e.d.

5. Berechne die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_2(x)|^2$ des Teilchens in Gebiet (2) und vergleiche das Ergebnis mit der Erwartung für ein **klassisches** (nicht quantenmechanisches) Teilchen.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeits(dichte) eines Teilchens am Ort x wird durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion an dieser Stelle gegeben. Für Gebiet (2) lautet sie hier:

$$|\psi_2(x)|^2 = C^2 \cdot \exp(-2\alpha x) = C^2 \cdot \exp[-2x \cdot \{(2m/\hbar^2) \cdot (V_0 - E)\}^{1/2}]$$

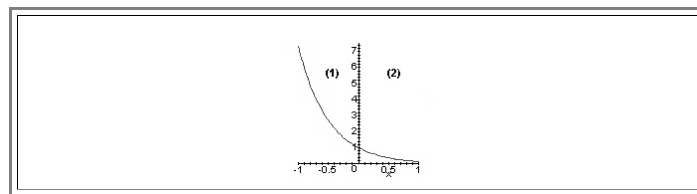
Da $V_0 > E$ vorausgesetzt wird, ist α reell und wir haben schlicht eine abklingende Exponentialfunktion.

Was würden wir für ein **klassisches** Teilchen erwarten? Zum Beispiel für eine Kanonenkugel, die auf einen Tafelberg zufliegt, mit einer Flughöhe die kleiner ist als die Berghöhe?

Für klassische Teilchen erwarten wir einfach perfekte Reflektion: **Niemals**, auch nicht einmal ansatzweise, ist das Teilchen im Bereich (2) zu finden.

Unser quantenmechanische Teilchen kann jedoch mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit nach Maßgabe der obigen Formel im Bereich (2) gefunden werden! Es kann in Bereiche eindringen, die klassischen Teilchen vollständig verwehrt sind.

Die folgende Graphik zeigt schematisch wie das aussieht (für $C = 1$)



Die Graphik zeigt auch wie diese Lösung im Bereich (1) aussehen würde, wo sie aber keinen Sinn ergibt (siehe unten)!

6. Was könnte passieren, wenn statt einer Potentialschwelle eine dünne Barriere genommen wird?

Falls der Potentialsprung z.B. nach $x = 0,5$ in obiger Graphik "zu Ende" ist, d.h. wir eine Potentialbarriere der Höhe V_0 und Breite $0,5$ hätten, dann hätten wir eine **endliche** Wahrscheinlichkeit, das Teilchen auf der **anderen** Seite der Barriere zu finden: es kann durch die Barriere **durch "tunneln"**.

Klassisch würde das bedeuten, daß Kanonenkugeln, die man gegen eine Mauer schießt gelegentlich auf der andern Seite auftauchen - **ohne** daß die Mauer ein Loch hat!

7. Warum macht die Lösung $\psi_1(x) = C' \cdot \exp(-\alpha x)$ für Gebiet (1) physikalisch keinen Sinn (selbst wenn wir einen anderen Vorfaktor C' nehmen)?

$\psi_1(x) = C' \cdot \exp(-\alpha x)$ macht als Lösung für Gebiet (2) keinen Sinn, da $\psi_1(x)$ **nicht geeignet normiert werden kann**.

$$1 \neq \int_0^{\infty} |\psi_1(x)|^2 \cdot dx$$

Das ist auch sofort aus der Graphik ersichtlich. Wir brauchen **andere** Lösungen; eben die komplexe oben gegebene Funktion.

8. Welcher Grenzfall führt bei diesem Problem auf das klassische Ergebnis?

Obwohl es klassische Teilchen gar nicht gibt, wird der **Tunneleffekt** bei "normalen" Verhältnissen **nie** beobachtet. Es ist jetzt auch leicht zu sehen warum:

- Um das klassische Ergebnis zu erhalten, muß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_2(\mathbf{x})|^2 \Rightarrow 0$ gehen. Dies können wir auf **zwei** Weisen erreichen:
- 1. Indem wir $\alpha \Rightarrow \infty$ laufen lassen. Dies entspricht einer **unendlich hohen** (nicht überwindbaren) Potentialstufe. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in Gebiet **(2)** anzutreffen, ist dann immer gleich null, so daß wir auf das klassische Ergebnis kommen.

Das ist aber nicht sehr befriedigend; wir wollen ja nicht nur bei großen Energiedifferenzen zur klassischen Betrachtung kommen. Besser ist:

- 2. Die Teilchenmasse wird erhöht. Nehmen wir ein Proton, anstelle eines Elektrons, d.h. rund und roh die **2 000** fache Masse, wird $|\psi_2(\mathbf{x})|^2$ mit $\exp-(2\,000)^{1/2} = 3,78 \cdot 10^{-20}$ multipliziert - spätestens jetzt ist die Wahrscheinlichkeit ziemlich dicht bei Null!

[Zurück zur Aufgabe](#)

Lösung zur Übung 2.1-7

Tunneleffekt

Illustration

1. Wie verhält sich ein klassisches Teilchen in dem Barrierenpotential?

- Ein klassisches Teilchen würde von der Barriere bei $x = 0$ vollkommen reflektiert werden.

2. Wie lautet die Schrödinger-Gleichung eines Teilchens in Gebiet (I)?

- Siehe die [Lösung zu Aufgabe 2.1-5](#)

4. Eine allgemeine Lösung Schrödinger-Gleichung in Gebiet (II) ist:

$\psi_2(x) = C \cdot \exp(-(\kappa \cdot x)) + D \cdot \exp(+(\kappa \cdot x))$. Welchen Wert nimmt der [Wellenvektor](#) κ in diesem Gebiet an?

- Der Wellenvektor κ im Gebiet (II) hat den Wert $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$,
siehe die [Lösung zu Aufgabe 2.1-5](#) (in der wir α statt κ geschrieben haben).

5. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung in Gebiet (III) lautet:

$\psi_3(x) = F \cdot \exp(+ikx)$

mit dem Wellenvektor

$k = (2mE)^{1/2}/\hbar =$

wie zuvor.

Warum macht eine Lösung der Form

$\psi_3(x) = F \cdot \exp(-i(k \cdot x)) + G \cdot \exp(+i(k \cdot x))$, d.h. mit einem zweiten Summand mit negativen Exponent wie in Gebiet (1), keinen Sinn?

- Im Gebiet (III) macht eine Lösung mit einem **negativen** Argument in der Exponentialfunktion keinen Sinn, da es keine **rücklaufende** Welle gibt.
- Die Exponentialfunktionen beschreiben nämlich nichts anderes als die **Momentaufnahmen** von Wellen, die in x bzw. $-x$ Richtung laufen.
- Vor der Potentialbarriere kann es in voller Allgemeinheit beide Arten geben; die in $-x$ laufende Welle trifft aber nie auf die Barriere. Wellen, die durch die Barriere durchgetunnelt sind, müssen notwendigerweise in $+x$ Richtung laufen.
- Das muß man an dieser Stelle noch so richtig verstehen - es geht nur darum zu sehen, wie man mit der Schrödingergleichung rechnen kann und selbst bei relativ simplen Problemen auf ganz neuartige Dinge stößt.

6. Um den Zusammenhang der Konstanten **A**, **B**, **C**, **D** und **F** zu ermitteln muß man welche Bedingungen verwenden?

- Die **Stetigkeitsanforderungen** an die Wellenfunktion ψ und ihre Ableitungen.
- Für $x = a$ lauten sie beispielsweise
: .
- Stetigkeit für ψ

$$A \cdot \exp(-ika) + B \cdot \exp(+ika) = C \cdot \exp(+ka) + D \cdot \exp(-ka)$$

- Stetigkeit für $d\psi/dx$.

$$-Aik \cdot \exp(-ika) + Bik \cdot \exp(+ika) = Ck \cdot \exp(+ka) + Dk \cdot \exp(-ka)$$

- Daß die Wellenfunktion und ihre Ableitung stetig sein muß. ist einerseits "irgendwie" klar, aber gar nicht so ganz einfach sauber zu begründen.
- Wie auch immer, wir bekommen 4 Gleichungen für die **fünf** Unbekannten **A, B, C, D** und **F** - eine zuwenig. Aber wir haben auch noch die **Normierungsbedingung** als 5. Gleichung!
- Damit kann man - mühsam, mühsam - die Koeffizienten ausrechnen. Das mag lange dauern, zu langen Formeln führen, oder sogar analytisch gar nicht machbar sein. Es ist aber auch nicht komplizierter als das Balkenbiegen in der technischen Mechanik mit stückweise zusammengesetzten Lösungen bei ungleichmäßig belasteten Balken mit diversen Einspannungen

7. Für den hier betrachteten Fall eines von links einlaufenden Teilchens kann man folgenden Zusammenhang zwischen den Konstanten **A**, **B** und **F** ermitteln:

$$A = F \cdot \cosh(2\kappa a) + i \cdot \delta \cdot 2\sinh(2\kappa a) \cdot \exp(2ika)$$

$$B = -F \cdot i \eta \cdot 2\sinh(2\kappa a)$$

● Dabei gilt:

$$\delta = \kappa k - k\kappa$$

$$\eta = \kappa k + k\kappa$$

Lösungen zur Übung 2.2-1

Bindungsenergie - Einfache Integrale ausrechnen

Illustration

Aus den Daten der Tabelle soll die Bindungsenergie des Ionenpaars Kalium-Chlor in Elektronenvolt (**eV**) und in Joule (**J**) bestimmt werden.

Die Bindungsenergie in Joule berechnet sich zu:

$$E_{\text{Bin}} = \int_{a_0}^{\infty} \frac{q_K \cdot q_{\text{Cl}}}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} dr = - \left. \frac{q_K \cdot q_{\text{Cl}}}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right|_{a_0}^{\infty}$$

Den Abstand **a₀** erhalten wir als Summe der Ionenradien **r**, diese wiederum finden sich in der [Tabelle](#) als

● **r_{Cl} = 181 pm, r_K = 133 pm**


● Damit haben wir **a₀ = 314 pm**

Einsetzen ergibt

$$E_{\text{Bin}} = \frac{(1,602 \cdot 10^{-19} \text{ As})^2}{4\pi \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}} \cdot \frac{1}{314 \cdot 10^{-12} \text{ m}} = 5,6 \cdot 10^{-19} \text{ AVs} = 5,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 3,5 \text{ eV}$$

● Wobei wir entweder schlau genug waren, die Umrechnung von **J** in **eV** [nachzuschauen](#), oder direkt aus der Elementarladung (mal **1 V**) zu nehmen.

Lösungen zur Übung 2-7

 Tip zur Elektronenkonfiguration: Sie steht in jedem Periodensystem. Falls Sie gerade kein [Periodensystem](#) zur Hand haben ist her der [Speziallink](#).

 Hier finden Sie die [Schalenbilder](#) von Kalium und Chlor.

 Hier finden Sie den [zweidimensionalen Kristall](#).

Lösungen zur Übung 2.2-4:

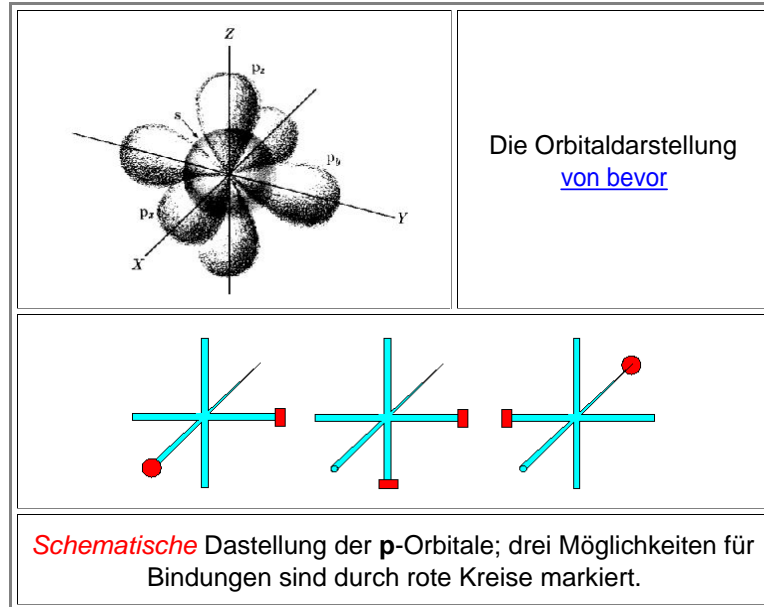
C und Si Verbindungen mit und ohne Hybridisierung

Illustration

Welche Bindungstypen³ sind für keine Hybridisierung, oder für sp^1 , sp^2 oder sp Hybridisierung möglich?

Machen wir uns zunächst eine einfache Schematik der "Bauklötzchen", die man zusammenfügen kann.

Das sieht dann für **keine** Hybridisierung z.B. so aus:



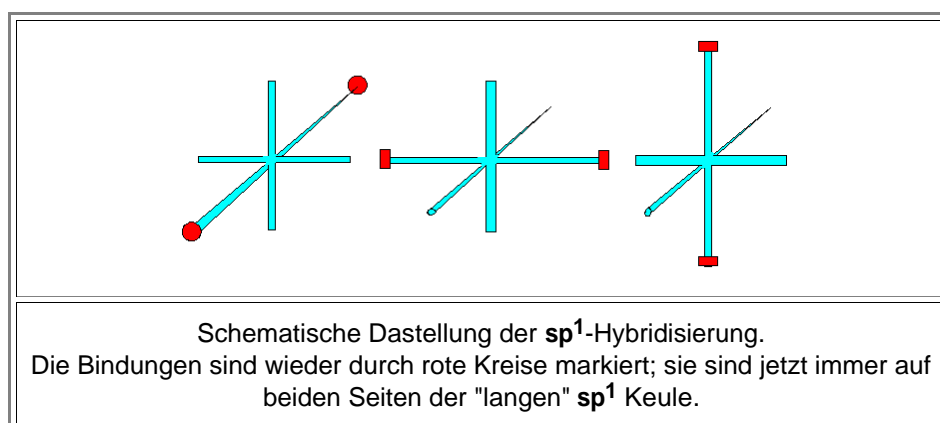
Wir können die Klötzchen jetzt an den roten Enden nach Belieben zusammenfügen, aber:

Alles was man also erhalten kann sind "zick-zack" Ketten, die sich dann vielleicht noch verknäueln; aber ein "richtiger" Kristall ist ausgeschlossen

Betrachten wir als nächstes die sp^1 Hybridisierung. Dann erhalten wir **eine** "große" Keule die auf beiden Seiten eine starke σ -Bindung eingehen kann.

Die verbleibenden **p**-Keulen können nur noch schwache π -Bindungen in Richtung der σ -Bindungsachse eingehen.

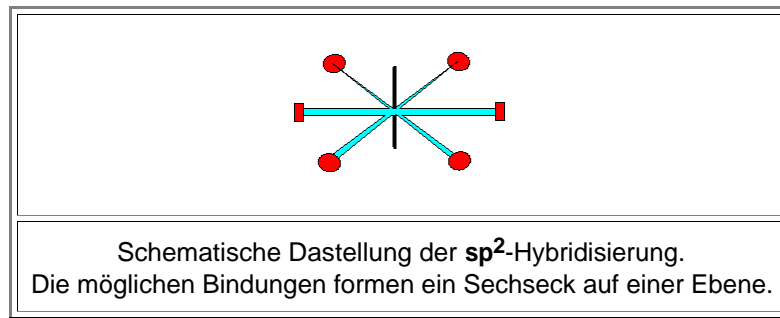
Schematisch sieht das so aus:



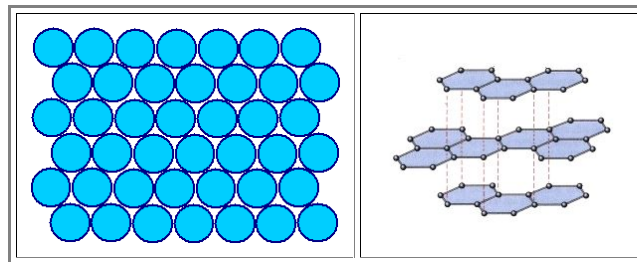
Kristalle sind **nicht** möglich, dafür aber gerade lange Ketten - hier entstehen Polymere und die Biologie.

■ Betrachten wir als nächstes die [sp² Hybridisierung](#). Dann erhalten wir **6** in einer Ebene liegenden Keulen mit **6**-zähliger Rotationssymmetrie, die alle Bindungen eingehen können.

- Die zwei verbleibenden **p**-Keulen können nur eine schwache π -Bindungen in Richtung der σ -Bindungsachsen eingehen.
- Schematisch sieht das so aus:



- Wir können einen schönen zweidimensionalen hexagonalen Kristall bilden, so wie unten und [im Link](#) gezeigt.



■ Links die Anordnung der **C**- oder **Si**-Atome auf einer Ebene, rechts der daraus formbare Kristall, falls zwischen den Ebenen (mit starker kovalenter Bindung) wenigstens noch eine schwache Bindung möglich ist.

- Was wir dann bekommen ist **Graphit** für den Kohlenstoff; die stabile Form als Festkörper.

■ **sp³** Hybridisierung brauchen wir hier nicht zu behandeln, sie ist im Haupttext ausführlich dargestellt.

- Silizium kristallisiert ausschließlich in der mit **sp³** Hybridisierung möglichen [Diamantstruktur](#). Das braucht nicht weiter dargestellt werden; es genügt den Link zu betätigen.
- Kohlenstoff kann **auch** das Diamantgitter annehmen - aber nur wenn man es dazu zwingt. Es braucht extrem hohe Drücke und Temperaturen; der resultierende Diamant ist dann unter Normalbedingungen metastabil.

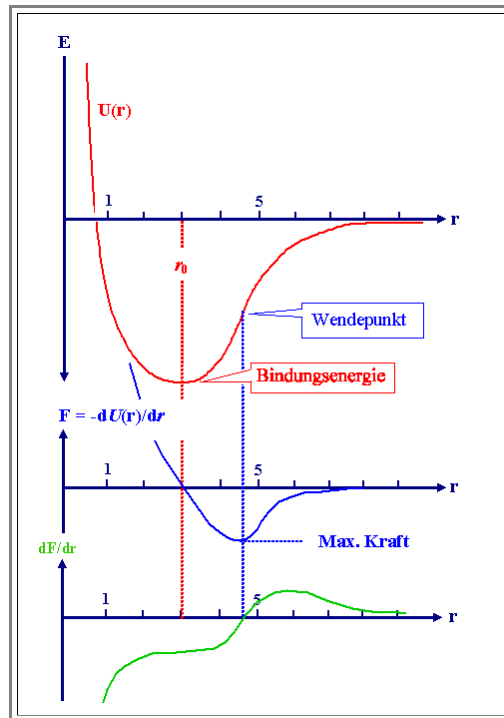
Lösungen zur Übung 2.3-1

Illustration

Beantworten Sie für den gegebenen Potentialtopf folgende Fragen:

- Wo liegt r_0 ?
- Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)
- Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das 2. Diagramm unterhalb einzeichnen)
- Wie müsste die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?
- Wie sieht die 2. Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?

Hier ist erstmal das ausgefüllte Diagramm



Jetzt zu den Fragen:

Wo liegt r_0 ?

- Eingezeichnet; beim Minimum der Potentialkurve

Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)

- Eingezeichnet; entspricht Tiefe des Potentialtopfes.

Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das 2. Diagramm unterhalb einzeichnen)

- Eingezeichnet

Wie müsste die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?

- Die Kraftkurve müsste eine Gerade sein; dazu gehörte ein parabelförmiges Potential.

Wie sieht die 2. Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?

- Eingezeichnet. Der Nulldurchgang erfolgt beim Abstand maximalen Kraftaufwands um das Molekül zu trennen. Bei größerem Abstand kann man dann mit kleinerer Kraft das Molekül komplett zerlegen.

Lösungen zur Übung 2.4-1

Berechnung des E-Moduls aus dem Bindungspotential

Illustration

Gegeben sei das Bindungspotential

$$U_{\text{Bindg}} = - \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

- 1. Wie groß ist der Elastizitätsmodul ausgedrückt in U_{Bindg} ? Für [Hinweise zur Ableitung der Grundformel](#) siehe den Hauptstrang
- 2. Zeige, daß sich folgende Formel ergibt

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

Zum ersten Teil der Aufgabe

Um den Abstand eines Atoms in irgendeiner Anordnung mit Bindungsabstand r_0 zu seinen Nachbarn zu ändern, muß eine Kraft F angreifen, die dann auf die für ein Atom spezifische Fläche $A = r_0^2$ wirkt.

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

$$\sigma = \frac{F}{r_0^2}$$

- Der Abstand zu den Nachbarn wird sich ändern, die zugehörige Dehnung ϵ ist

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

- Die Kraft F um *gegen* das Bindungspotential das Atom zum Ort r zu bringen ist direkt durch die [Ableitung des Potentials](#) $U(r)$ gegeben, wir haben $F = +dU(r)/dr$.
- Wir haben ein **plus** anstelle eines minus Zeichens, denn wir betrachten jetzt die Kraft die gegen die rücktreibende Kraft des Potentials "arbeitet".

Der E-Modul E war definiert als

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

- Setzt man alle Beziehungen von oben ein, berücksichtigt die Kettenregel ($d\sigma/d\epsilon = d\sigma/dr \cdot dr/d\epsilon$) mit $dr/\epsilon = r_0$, erhält man

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

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

Für kleine elastische Verformungen müssen wir die zweite Ableitung dann natürlich an der Stelle $r = r_0$ nehmen.

- Soweit zum ersten Teil der Aufgabe. Der zweite ist rein mathematisch: Wir müssen die Bindungspotentialfunktion zweimal ableiten. Wir haben

$$U_{\text{Bindg}} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

- Außerdem noch die Definitionen

$$\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r_0} = 0$$

$$U(r_0) = U_0$$

Damit können wir die unbekannten Konstanten A und B eliminieren und E in den Variablen r_0 , U_0 , m und n ausdrücken.

Zum zweiten Teil der Aufgabe

Zunächst ergibt sich durch einmal ableiten

$$\frac{dU}{dr} = n \cdot A \cdot r^{-(n+1)} - m \cdot B \cdot r^{-(m+1)}$$

- Oder, etwas umgeschrieben

$$\frac{dU}{dr} = \frac{n}{r} \cdot A \cdot r^{-n} - \frac{m}{r} \cdot B \cdot r^{-m}$$

- Für $r = r_0$ gilt $dU/dr = 0$ und deshalb

$$A \cdot r_0^{-n} = \frac{m}{n} \cdot B \cdot r_0^{-m}$$

Eingesetzt in die Potentialgleichung erhalten wir für U_0

$$U_0 = - \frac{m}{n} \cdot B \cdot r_0^{-m} + B \cdot r_0^{-m} = \frac{n-m}{n} \cdot B \cdot r_0$$

$$\Rightarrow B \cdot r_0^{-m} = U_0 \cdot \frac{n}{n-m}$$

Weiter ergibt sich

$$A \cdot r_0^{-n} = -U_0 \cdot \frac{m}{m-n}$$

Die beiden Parameter **A** und **B** können damit elimiert werden, wir haben

$$A = -U_0 \cdot r_0^n \cdot \frac{m}{m-n}$$

$$B = U_0 \cdot r_0^m \cdot \frac{n}{n-m} = -U_0 \cdot r_0^m \cdot \frac{n}{m-n}$$

Zweimal ableiten führt jetzt auf den E-Modul.

Differentiation der ersten Ableitung von oben ergibt

$$\frac{d^2 U}{dr^2} = - \frac{n \cdot (n+1)}{r^2} \cdot A \cdot r^{-n} + \frac{m \cdot (m+1)}{r^2} \cdot B \cdot r^{-m}$$

Für den E-Modul brauchen wir den Wert der 2. Ableitung am Potentialminimum, d.h. bei $r = r_0$. Dabei können wir die obigen Ausdrücke für $A \cdot r_0^{-n}$ und $B \cdot r_0^{-m}$ verwenden und erhalten

$$\frac{d^2 U}{dr_0^2} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{n \cdot m \cdot (n+1)}{m-n} - \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{n \cdot m \cdot (m+1)}{m-n}$$

$$\frac{d^2 U}{dr_0^2} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{[-n \cdot (n+1)] + [n \cdot m \cdot (m+1)]}{n-m} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{-n^2 \cdot m - nm + nm^2 + nm}{m-n} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{-n^2 \cdot m + nm^2}{m-n} = \frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^2}$$

Mit der Formel für **E von oben** erhalten wir das Endergebnis

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

Das Minuszeichen ist notwendig, da U_0 in dieser Systematik eine negative Größe ist. Der E-Modul ist damit - wie es sein muss - eine positive Größe.

Wow! Was für eine Rechnerei für ein einfaches Ergebnis! Das wird uns aber noch öfters begegnen - beim thermischen Ausdehnungskoeffizienten, zum Beispiel (da ist der mathematische Aufwand sogar noch erheblich größer!).

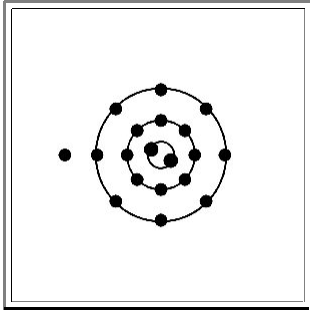
- Der eine oder die andere mag jetzt den Mut verlieren, weil er oder sie für so eine Rechnerei Stunden braucht und sich mehrmals verrechnet.
- Darauf kommt es aber nicht an. Ich brauche auch Stunden und verrechne mich grundsätzlich bei solchen Aufgaben. Entscheidend ist aber nicht wie lange an braucht sondern:
 - Dass man begriffen hat, was man im Prinzip ausrechnen kann (d.h erkennt, wie die Fragestellung in ein rein mathematisches Problem überführt wird).
 - Dass man sich dann die Rechnung oft sparen kann, weil andere das schon gemacht haben. Man muß aber verstehen, was genau die anderen gemacht haben, damit man damit was anfangen kann.

Zu Übung 2.2-3: Die Schalenbilder

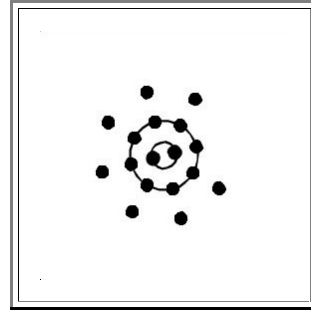
Illustration

Hier die schematischen Schalenbilder

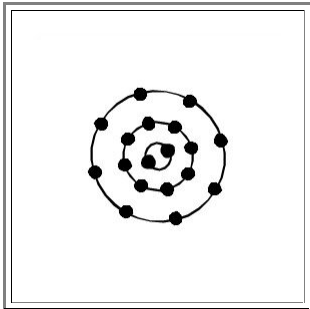
Kaliumatom



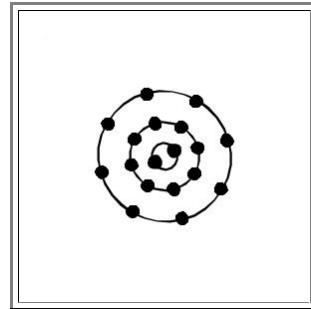
Chloratom



Kalium-Ion



Chlor-Ion



Die Ionen sehen gleich aus, da wir *nur die Elektronen* betrachten und die Abstände nicht massstäblich sind. Die Kerne sind natürlich verschieden!!



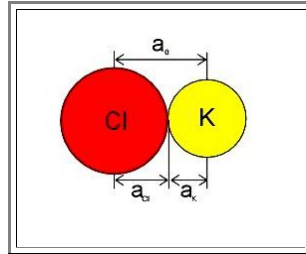
[Zurück zur Aufgabenlösung](#)

Übung 2.2-1

Lösungshilfe

Als erstes benötigen wir eine Formel zur Berechnung der Bindungsenergie.

- Wir finden diese in Kapitel 2.2.1 unter [Bindungsenergie](#). In dieser Formel benötigen wir den Bindungsabstand a_0 , dieser ist die Summe der beiden Ionenradien, da wir eine Kugelgestalt der Ionen annehmen und uns vorstellen, daß diese sich in der Bindung gerade berühren:



- Der in Elektronenvolt (**eV**) berechnete Wert muß dann noch umgerechnet werden, dazu kann man [Tabellen](#) zu Hilfe nehmen

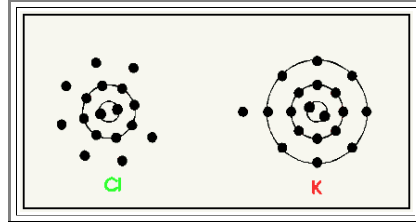


Lösung

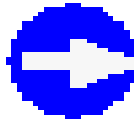
Hier sieht man ein hüpfendes Elektron!

Illustration

- Durch die Ionisation treten Kräfte auf, die zu einer Annäherung der beiden Atome führen.
- Sobald das Elektron "gehüpft" ist, nähern sich die beiden Ionen sehr schnell bis zum Bindungsabstand.
- Man muß schnell schauen, um das zu sehen!
- Das ganze ist natürlich nicht ernst gemeint!



HTML-Version von: Christian Rieck und Holmer Denks, erstellt im Februar 1999



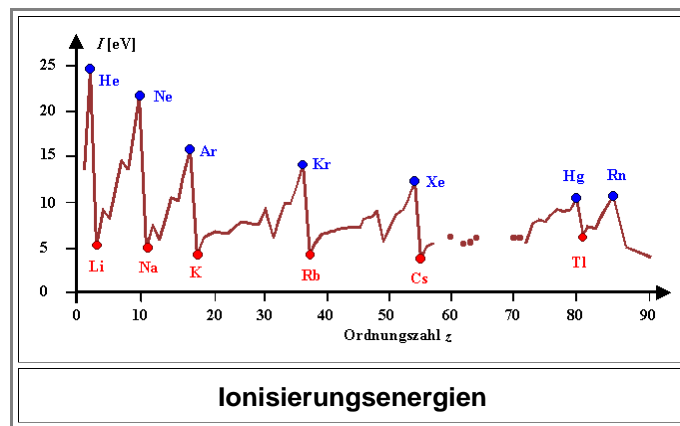
[Zurück zur Aufgabe](#)

Ionisierungsenergien und Elektronegativitäten einiger Elemente

Illustration

Zahlenwerte für die **Ionisierungsenergie** für praktisch alle Elemente finden sich über die Links, die vom Modul **Periodensystem** ausgehen.

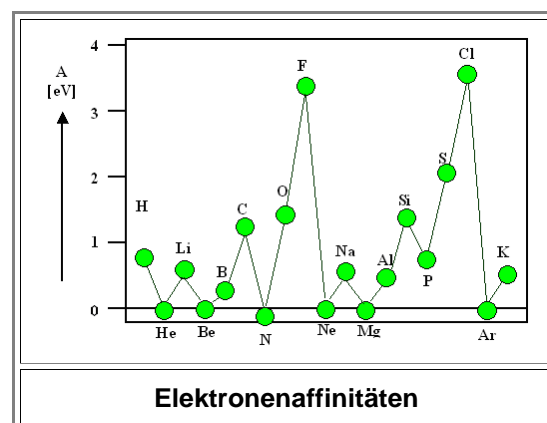
- Hier sollen nur graphische Darstellungen gezeigt werden, die insbesondere die Trends dieser Materialparameter aufzeigen.



- Wie nicht anders zu erwarten, wehren sich die Edelgase am meisten, die Alkalielemente am wenigsten, wenn man ihnen ein Elektron wegnehmen will.
- Außerdem wird klar, daß **Cs** die kleinste Ionisierungsenergie aller Elemente hat.

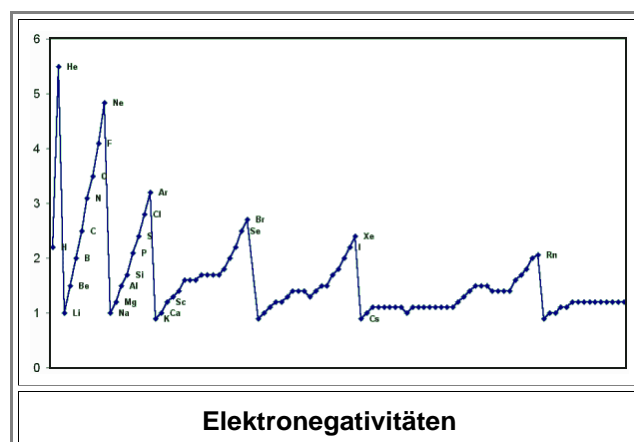
Elektronenaffinitäten sind nicht ganz so einfach darzustellen

- Hier ist eine Grafik für einige Elemente

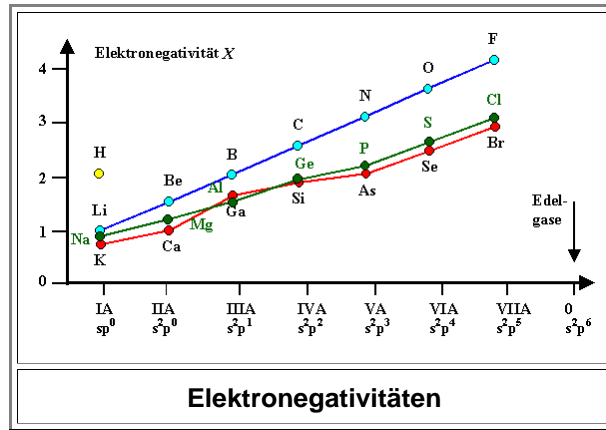


- Die Edelgase und einige andere Elemente sind ganz leicht im Negativen (so bei **0,2 - 0,5 eV**); die höchsten Affinitäten haben natürlich die Halogene.
- Falls man die Grafik weiterführt, kommen auch kräftige negative Werte, insbesondere für die Erdalkali Elemente (z.B. $A_{Ca} = -1,93 \text{ eV}$; $A_{Sr} = -1,51 \text{ eV}$).

Als nächstes eine Graphik für die **Elektronegativität**. Der Trend ist relativ klar; die Edelgase sind nur als Referenzpunkte eingetragen (und weil aus einigen der diversen Formeln Werte herauskommen), die Angabe einer Elektronegativität macht für sie aber nicht viel Sinn.



Hier noch eine alternative Darstellung mit der Elektronenkonfiguration als Variable.

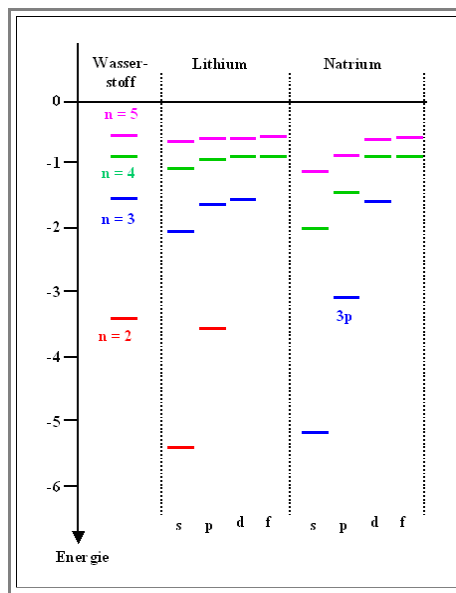


[Mehr zur Elektronegativität](#) in einem "advanced" Modul.

Termschemata einiger Elemente

Illustration

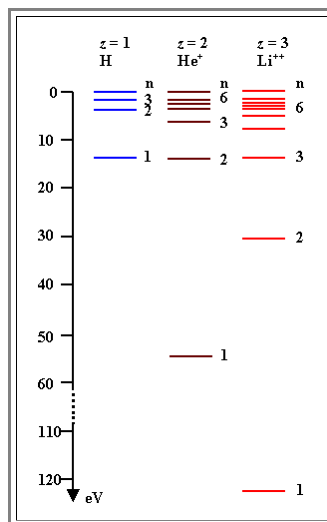
Hier das exakte Termschema von **H**, **Li** und **Na** im Vergleich. Gezeigt sind nur die Niveaus bis $n = 5$.



- Beim **Li** ist das letzte besetzte Niveau das **2s** Niveau, es enthält ein Elektron; beim **Na** ist es das **3s** Niveau.
- Die "weiter oben" liegende Niveaus können besetzt werden, wenn man dem Elektron genau die richtige Energie zuführt. Früher oder später wird es wieder zurückfallen, und dann Licht mit der für die Energieunterschiede charakteristischen Frequenz aussenden.

Hier noch der Vergleich zwischen **H**, **He⁺** und **Li²⁺** - eine, zwei, oder 3 positive Ladungen, "umkreist" von *einem* Elektron.

- Das Bohrsche Modell ist voll anwendbar; es ergeben sich auch strukturell identische Termschemata - nur die Energieskala ist anders.



Ionen- und Atomradien

Illustration

Wie definiert man den Radius eines Atoms oder eines Ions? Es hat ja keine scharfe Grenze, sondern die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektronen weiter weg vom Kern werden halt nur immer kleiner

Einfach! Entweder nimmt man das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit, oder, noch besser, den Radius, dem man experimentell findet. Denn Wahrscheinlichkeit hin- oder her; letztlich muß man messen. Und eine Messung liefert immer eine saubere Zahl (von Meßfehlern, Rauschen etc. mal abgesehen).

Allerdings kann man Ionenradien nicht mit dem Geodreieck messen - die verfügbaren Methoden haben alle diverse Vor- und Nachteile. So ist es auch kein Wunder, daß man für ein- und dasselbe Ion verschieden Zahlen findet, je nach Quelle.

Die nachfolgende Tabelle ist ein typisches Sammelwerk, in das immer mal wieder neue Werte aufgenommen werden. Weitere Zahlen finden sich auch in den Elementübersichten, die vom Periodensystem aus zugänglich sind.

Die Einheit hier ist das Ångström [\AA]; $1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$

Quellen sind der "Atkins", der "Kittel" und der "Fasching" soweit es die Goldschmidt und Pauling Werte betrifft.

Wobei durchaus möglich ist, daß die beiden ersten Quellen auch zum Teil auf die Goldschmidt und Pauling Werte zurückgreifen.

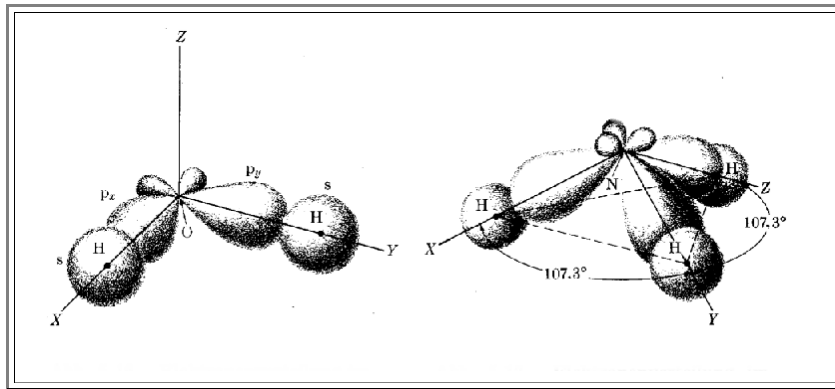
Bei Werten aus anderen Quellen fehlt der kennzeichnende farbige Hintergrund

	2-	1-	1+	2+	3+	4+	5+	6+
Kittel		1,36	0,68					
Atkins		1,33	0,59					
Goldschmidt	O	F	Li	Be	B	C	N	
Pauling	1,32	1,33	0,78	0,34	0,20	0,15	0,11	
	1,40	1,36	0,60	0,31	0,20	0,15	0,11	
		1,81	0,97					
		1,81	1,02					
	S	Cl	Na	Mg	Al	Si	P	S
	1,74	1,81	0,98	0,78	0,57	0,39	0,35	0,34
	1,84	1,81	0,95	0,65	0,50	0,41	0,34	0,29
		1,95	1,33	0,99				
		1,96	1,38	1,00				
	Se	Br	K	Ca	Ga	Ge	As	Se
	1,91	1,96	1,33	1,06	0,62	0,44		0,35
	1,98	1,95	1,49	0,99	0,62	0,53	0,47	0,42
		2,16	1,48	1,13				
		2,20	1,49	1,16				
	Te	I	Rb	Sr		Sn	Sb	
	2,11	2,20	1,49	1,27		0,74		
	2,21	2,16	1,48	1,13		0,71	0,62	
			1,67	1,35				
			1,67	1,36				
			1,65	1,43		Pb	Bi	
			1,69	1,45		0,84	0,74	

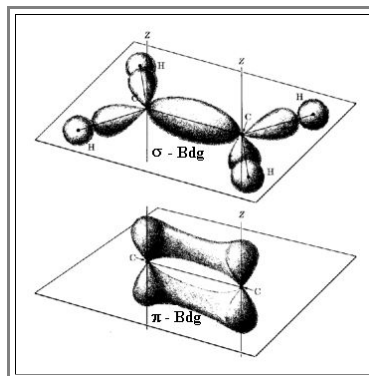
Kovalente Bindungsbilder in Orbitaldarstellung

Illustration

- Wir betrachten zunächst das Wasser- (H_2O) und das Ammoniak- (NH_3) Molekül. Die s -Orbitale der zwei Wasserstoffatome überlappen mit einem je p -Orbital des Sauerstoffs. Hier sind zwei Besonderheiten auffällig:
1. Die p -Orbitale sind verzerrt; sie sind auf der H -Atom Seite größer als auf der O -Atom Seite. Der Grund dafür ist, daß die Anwesenheit der H -Atome die Bewegung der p -Elektronen des O -Atoms etwas ändert oder **polarisiert**.
 2. Der Winkel zwischen den Bindungsachsen ist nicht 90° , wie er eigentlich bei p -Orbitalen sein sollte, sondern deutlich größer ($104,5^\circ$). Das liegt daran, daß jetzt auf der Wasserstoffseite des Moleküls im Mittel **mehr** negative Ladungen sind, die sich abstoßen.
- Als Konsequenz fallen die Ladungsschwerpunkte nicht mehr zusammen, das Molekül ist **polarisiert** und bildet einen **elektrischen Dipol**.
- Das **Dipolmoment** (= Ladung mal Abstand) ist $6,2 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$; es ist verantwortlich für die hohe **Dielektrizitätskonstante** ($\epsilon_r = 81$) des Wassers.
 - Ähnlich beim Ammoniak. Statt rechter Winkel finden wir $107,3^\circ$.
 - Das Dipolmoment ist $5,0 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.
- Aussehen tut das ganze so; links Wasser, rechts Ammoniak.

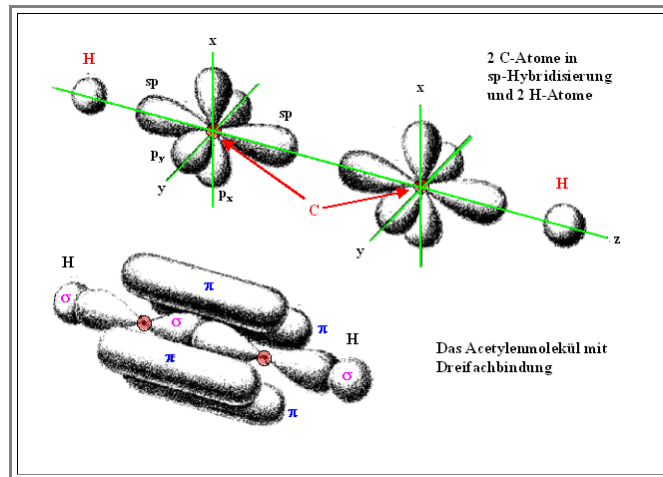


- Als nächstes betrachten wir Äthylen (C_2H_4). Die Kohlenstoffatome haben sp^2 -Hybridorbitale gebildet, um die je zwei H -Atome binden zu können.
- Bei der sp^2 -Hybridisierung werden die s -, p_x - und p_y -Wellenfunktionen kombiniert; die p_z -Wellenfunktion bleibt unverändert.
 - Damit entsteht eine σ -Bindung (in Richtung der Keulenachse) und eine π -Bindung (senkrecht zur Keulenachse) zwischen den Kohlenstoff-Atomen; die typische **$\text{C}=\text{C}$** Doppelbindung.

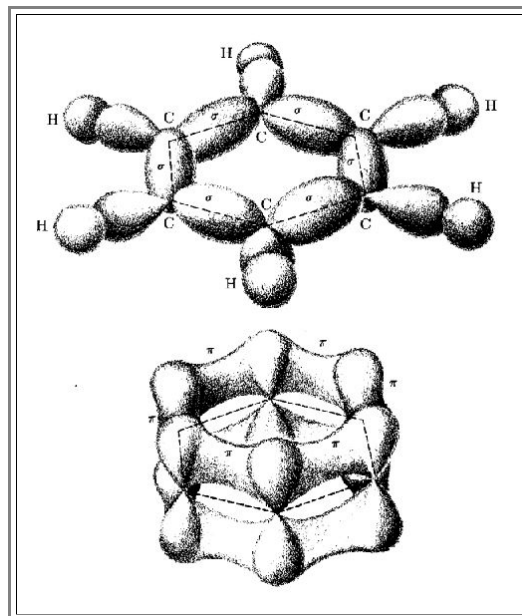


Es bleibt die **einfache sp**-Hybridisierung (auch **sp¹** geschrieben) ; sie liegt z.B. beim Acetylen (**C₂H₂**) vor.

- Das **sp** - Hybridorbital sieht aus wie einen verlängerte **p** - Keule. Wir haben die Kohlenstoff-Dreifachbindung; **1 x σ** und **2 x π**



Zum Schluß noch das schöne Benzolmolekül (**C₆H₆**): Es sollte nun klar sein, dass wir hier eine **sp²** Hybridisierung haben.



Manipulation mit Maßeinheiten

Nachfolgend ein Originalprotokoll des **schleswig-holsteinischen Landtags**. Es wird Antwort auf die Frage gegeben, was es kostet, Lehrer nicht mehr als **Beamte**, sondern als **Angestellte** einzustellen. Spart man oder legt man drauf?

- Schauen Sie nur kurz auf das Protokoll und fällen Sie eine Entscheidung: **Spart** das Land Geld oder hat es **zusätzliche Kosten**?

Illustration

		Haushalt 1998 = + 32.157,7 TDM
01.01.1999	= 246 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.380,0 TDM
	145 Stellen x 30,0 TDM	= + 4.350,0 TDM
	265 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.950,0 TDM
	295 Stellen x 30,0 TDM	= + 8.850,0 TDM
	262 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.860,0 TDM
01.08.1999	= 465 Stellen x 30,0 TDM x 6/13	= + 6.438,5 TDM
	Haushalt 1999 = + 42.828,5 TDM	
01.01.2000	= 246 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.380,0 TDM
	145 Stellen x 30,0 TDM	= + 4.350,0 TDM
	265 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.950,0 TDM
	295 Stellen x 30,0 TDM	= + 8.850,0 TDM
	262 Stellen x 30,0 TDM	= + 7.860,0 TDM
	465 Stellen x 30,0 TDM	= + 13.950,0 TDM
01.08.2000	= 540 Stellen x 30,0 TDM x 6/13	= + 7.476,9 TDM
	Haushalt 2000 = + 57.816,9 TDM	

b) Insgesamt entstehen in dem o.a. Zeitraum und nach den derzeitigen Personalplanungen Mehrkosten in Höhe von 175.373,1 TDM, dem stehen Einsparungen bei den Beihilfeaufwendungen im gleichen Zeitraum in Höhe von 16,1 Mio. DM gegenüber.

Für 2.218 Pensionsfälle wären heute Versorgungsleistungen in Höhe von 124 Mio. DM jährlich zu leisten.

Sichtbare Wellenfunktionen

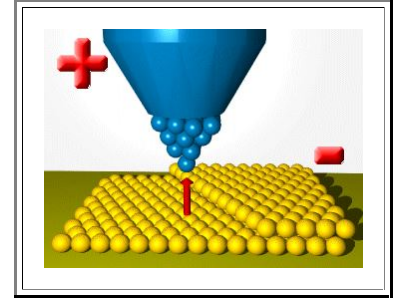
Illustration

Kann man Orbitale und **Wellenfunktionen** irgendwie direkt sehen? Mit einem Elektronenmikroskop oder sowas?

- Man kann nicht. Zumindest nicht direkt die Wellenfunktion ψ eines Elektrons. Sie ist in der Regel eine **komplexe** Funktion. Wie soll das aussehen?
- Wohl aber kann man die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit**, also ψ^2 unter günstigen Umständen direkt sehen.

Dazu nimmt man ein **Rastertunnelmikroskop**, abgekürzt **RTM**, oder gebräuchlicher **STM** (für scanning tunnel microscope) **1981** erfunden von Gerd **Binnig** und Heinrich **Rohrer**, die damals für das **IBM** Forschungslabor in Zürich arbeiteten. **1986** gab's dafür den Nobelpreis.

- Das Prinzip, wie nebenstehend dargestellt, ist extrem einfach: man nehme eine extrem scharfe Nadel, deren Spitze nur noch aus einem Atom besteht, und rastere (= scanning) sie im Abstand **< 1 nm** über die Oberfläche der zu untersuchende Probe. Daher das "Raster" im Namen.
- An die Nadel legt man den positiven, and die Probe den negativen Pol einer Spannungsquelle. Gemessen wird (im Prinzip) der in die Nadel fließende Strom; damit wird dann das Bild aufgebaut.
- Der Strom (praktisch nur noch aus einzelnen Elektronen bestehend) muß trotz des kurzen Abstands noch durch eine Energiebarriere fließen; das kann er aber bequem mit dem Tunneleffekt. Der Strom ist also ein Tunnelstrom, daher das "Tunnel" im Namen.



Bei der praktischen Umsetzung gibt es aber ein paar Haken und Ösen, die aber nur durchnummeriert werden sollen:

- Wie macht man eine derart scharfe Nadel?
- Wie hält man sie in einem konstanten winzigen Abstand?
Antwort: Indem man per Regelkreis den Strom konstant hält und die z-Achsenkoordinate variiert. Das Signal ist dann die z-Koordinate, oder besser gesagt, die Spannung, die man an den Piezokristall des Abstandshalters anlegen muß.
- Wie kann man mit einer mechanischen Präzision **< 0,01 nm** arbeiten? Das braucht man ja, um die notwendige Auflösung zu bekommen.?
- Wie vermeide ich kleinste Vibrationen meiner Anordnung, die ja das Bild komplett verwackeln würden?
- Wie messe ich die ja wohl ziemlich kleinen Tunnelströme mit der erforderlichen Präzision?
- Wie erhalte ich eine atomar halbwegs glatte und vor allem saubere Oberfläche der Probe?

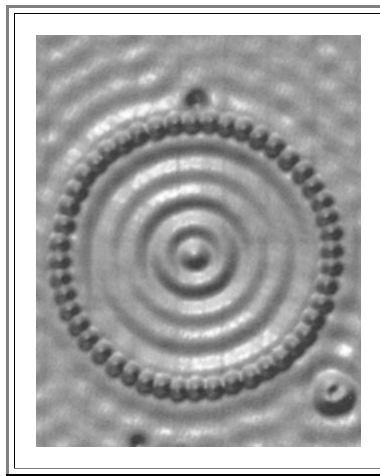
- So ganz umsonst gibt es den Nobelpreis halt doch nicht.

Wenn man all die Probleme gelöst hat, und tatsächlich ein Bild mit einer Vergrößerung von ca. **50 000 000 x** entstanden ist, stellt sich eine andere Frage: Was sehe ich eigentlich?

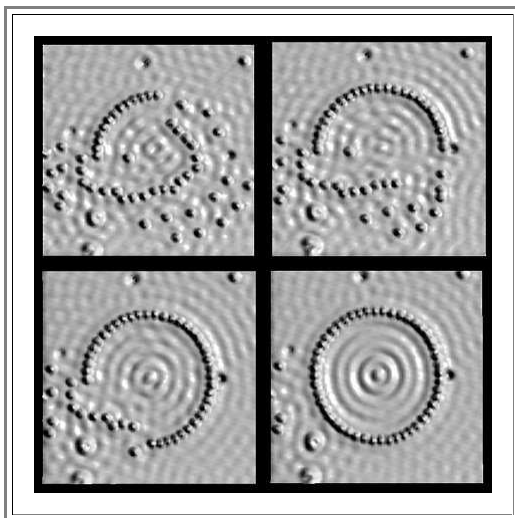
- Auch keine ganz simple Frage. Aber im großen und ganzen lautet die Antwort: Der Tunnelstrom ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeit, daß am betrachteten "Punkt" ein Elektron da ist mal der Wahrscheinlichkeit, dass es tunnelt.
- Falls die letztere Wahrscheinlichkeit halbwegs konstant ist, sehe ich also direkt die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** der Elektronen auf der Oberfläche der Probe.

Das wird besonders interessant, wenn ich die Oberfläche der Probe noch geeignet manipulierte. Zum Beispiel kann ich auf eine sonst möglichst glatte und strukturlose Oberfläche eine Reihe Atome setzen, die einen geschlossenen Ring bilden.

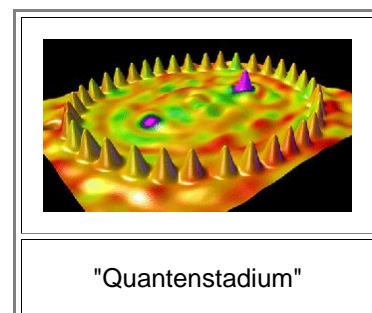
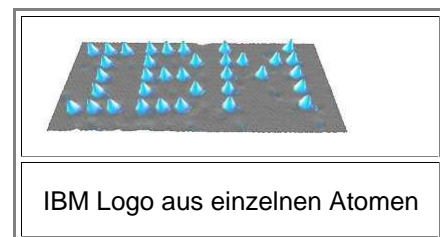
- Das ist wie ein Zaun, oder ein Korral ("corral") für ein Elektron, das ich in diesen Pferch einbringe. Was ich dann sehe sieht dann so aus.



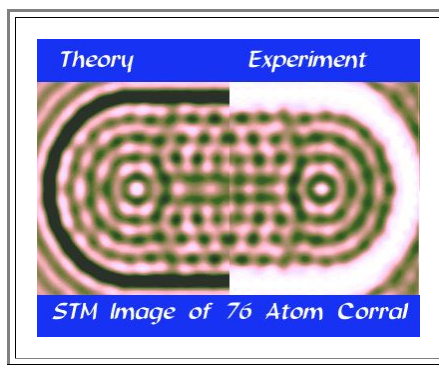
- Das ist ein sensationelles Bild. Es wurde **1993** von Crommie, Lutz and Eigler (IBM Almaden) erstellt. Die "Welle" in dem von **48** Eisenatomen auf der **{111}** Oberfläche von Kupfer geformten runden Korral ist **ein** Elektron. Wir sehen direkt das Quadrat seiner Wellenfunktion, oder genauer das Quadrat der gerade eingenommenen Wellenfunktion (das Elektron in dem durch die **Fe** Atome gebildeten runden Potentialtopf hat mehrere mögliche Zustände).
- Es erübrigt sich festzuhalten, daß das gemessene ψ^2 exakt auf das gerechnete paßt (in Matwis II werden wir eine ziemlich ähnliche Situation selbst berechnen).
- Eine Frage drängt sich auf: Wie bekommt man **48 Fe** Atome dazu, auf einem Kupferkristall Ringelreihen zu spielen?
- Durch "**Nanotechnik**". Man benutzt das **STM** als einen Mikromanipulator. Erst bringt man genügend **Fe** Atome irgendwie verteilt auf die **Cu** Oberfläche. Dann schaut man nach wo sie sind, und bringt dann ein **Fe** Atom dazu, an der Spitze hängenzubleiben.
- Dann fährt man mit der Spitze zum gewünschten Platz und setzt das Atom dort wieder ab. Eigentlich einfach - im Bild unten sieht man die verschiedenen Stadien des Aufbaus eines Quantenkorral.



- Spätestens jetzt setzt beim normalen Wissenschaftler der Spieltrieb ein:



- Man kann statt runden auch elliptische oder anders geformte Korralle bauen; das Bild rechts zeigt solche ein Gebilde.
- 36 Co** Atome bilden eine Ellipse, ein zusätzliches **Co** Atom sitzt in einem Brennpunkt der Ellipse (rechts oben). Das im Korral herumtobende Elektron hat eine komplexere Wellenfunktion als im Kreiskorral, insbesondere ist es auch ganz gern im zweiten Brennpunkt, obwohl da gar kein Atom sitzt - eine Art Quantenecho. (Courtesy of IBM.) reported by: Manoharan et al., in Nature, 3 February 2000
- Wie gut Messung und Rechnung übereinstimme, zeigt ein letztes Bild (für ein "Stadium") durch direkten Vergleich (von der Heller-Forschungsgruppe der Uni Harvard).

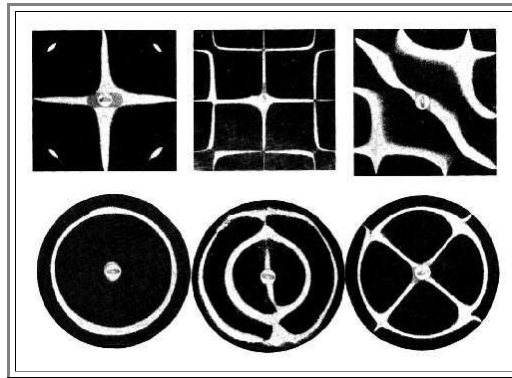


Ein Bild sagt mehr als tausend Worte: Die Quantentheorie "stimmt"; die Schrödingergleichung bestimmt, wo's lang geht.

Chladnische Klangfiguren

Illustration

- Jede schwingende Trommelmembran "löst" eine (zweidimensionale) Differentialgleichung für die möglichen stehenden Wellen, die dann den Klang ergeben
 - Mathematisch gesehen ist das Problem fast genau dasselbe wie bei der (zweidimensionalen) Schrödingergleichung. Nicht einfach, aber machbar.
- Bei einer schwingenden Membran kann man die Lösungen aber auch experimentell bekommen.
 - Dazu wird die Membran permanent angetrieben (also nicht nur einmal mit dem Trommelstock angeschlagen); am einfachsten geht das, indem man eine lautsprecherartige Konstruktion macht.
 - Gibt man ein bißchen feinen Sand auf die schwingende Membran, wird der Sand sich rasch zu den Schwingungsknoten begeben, also zu den Plätzen der Membran, die sich nicht bewegen. Das ist ein klassischer Schulversuch, den jeder und jede gesehen haben sollte.
- Was man bekommt sind die **Chladnischen Klangfiguren**; unten sind einige für quadratische und runde Membranen dargestellt.

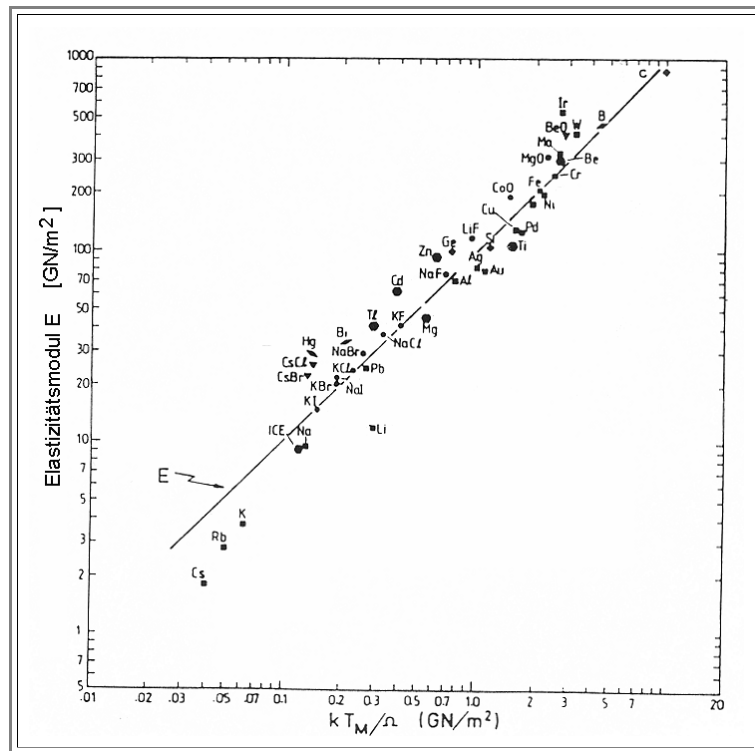


- Unsere (dreidimensionalen) **s**- **p**- und **d**- Orbitale sind auch nicht komplizierter, und, von höherer Warte aus gesehen, genau dasselbe: Stehende Wellen in einer bestimmten geometrischen Konfiguration.

Faustformel für den E-Modul

Wie gut ist die im [Hauptteil abgeleitete Faustregel](#) für den E-Modul?

Jemand, den ich leider nicht kenne, hat sich die Mühe gemacht das mal graphisch darzustellen. Hier ist das Bild:



Also das paßt schon ganz gut. Für $k T_M / \Omega = 1$ sind wir in der Tat in der Nähe von "80":

Cardanos Biographie, besprochen in der Süddeutschen vom April 1999

Illustration

Man vergleiche diese Buchbesprechung mit der Kurzbiographie im [Link](#).

- Kann es sein, daß hier wirklich über ein und die selbe Person geschrieben wird?
- Oder wird hier wieder mal das Hobby der **Süddeutschen** gepflegt, das da heißt "**Betrug in der Wissenschaft**"?
- Ob der Author der Rezension das Buch wohl gelesen hat? Kaum zu glauben, sonst könnten ihm die saftigen Details aus Cardanos Leben wohl kaum entgangen sein.

PS: Was wir über die **Astrologie** lernen ist auch nicht besonders tief schürfend. Kein seriöser Wissenschaftler, der Astrologie betrieb (und Astrologie war noch vor wenigen hundert Jahren eine an den Universitäten gelehrt Wissenschaft), wäre auf den Gedanken gekommen zu behaupten, daß die Planeten irgendwie **direkt** das menschliche Schicksal beeinflussen.

- Was geglaubt wurde (und was ja auch heute noch hie und da gepredigt wird) war, daß überirdische Mächte **alles** regeln, und daß das Wirken dieser Mächte sich **überall** manifestiert.
- Die Planeten dienten lediglich als das "Meßinstrument" für diese göttlichen Kräfte, das am einfachsten "abzulesen" ist. Man hätte genausogut die Bildung der Wolken oder den Vogelflug oder alles was sonst geschieht nehmen können, da eben **alles** was geschieht eine unmittelbare Folge dieses göttlichen "Kraftfeldes" ist und somit im Prinzip Rückschlüsse auf die universalen Kräfte zuläßt. Wenn man die Kräfte (oder die damit verbundenen göttlichen Absichten) kennt, kann man dieses Wissen benutzen, um die Wirkung auf den Menschen vorherzusagen.
- Da das Meßinstrument "Wolken" aber nur schwer eindeutig abzulesen ist, sind die Planeten einfach besser - sie haben sich durchgesetzt.
- Natürlich mögen sich die alten **Chaldäer**, auf die (wie man glaubt) die Astrologie zurückgeht, was anderes dabei gedacht haben, aber in der Renaissance galt in groben Zügen die obige Argumentation.

Und soviel blöder als die vielen anderen Theorien oder Dogmen über die Wechselwirkung Gott - Mensch - Universum ist dies Meinung ja nun auch nicht (wobei aber nicht gesagt werden soll, daß sie etwa intelligent sei!).

Samsstag/Sonntag, 17./18. April 1999

LITE

Konstellationen am Himmel und am Hofe

Karriere mit Astrologie: Anthony Graftons Biographie des Renaissance-Multitalents Cardano

Goethe schrieb über Cardano, ergehöre zu den Menschen, „mit denen die Nachwelt nie fertig wird“. Wer weiß, ob Cardano selbst das je geglaubt ist? In seiner Autobiographie schreibt er: „Das Buch ist geschrieben ohne jede Schminke und will niemanden belächeln; es begnügt sich mit der Erzählung bloßer Tatsachen und schildert Menschenleben... So habe ich mir denn meinen Lebensweg selbst zu rechtgelegt, nicht gerade zu frohlich, wie ich ihn mir hätte wünschen mögen, aber doch so gut, als es mir eben möglich war... Wer keinen geraden, sicheren Lebensweg vor sich sieht, der muß eben manche Wege gehen und mit mancherlei Winkelzügen vorwärts zu kommen suchen. Und wie er auch im einzelnen sich ändern mochte, beäuglich war in Grund genommen mein Zustand immer: keine Mittel und Muße, nicht Ehre, noch Amt, noch Macht, wohl aber jene Sehnsucht nach ewigem Ruhm.“

Schon an Cardanos Beschreibung seiner Rolle wird deutlich, worum es sich bei Anthony Graftons Buch handelt: Es liefert Wissenschaftsgeschichte von unten gesehen, nämlich aus der Perspektive der Geltungssucht - oder freundlicher der Perspektive der Verantwortung für eigene Leben. Die individuelle Selbstbestimmung ist die Verheißung, ja oft das einzige Lebensziel der Zeitgenossen, mit denen man es heute zu tun hat. Zum Problem wird das, wenn die eigenen Wünsche nach Freiheit in Konflikt geraten mit denen der anderen. Die Geschichte dieser riskanten Möglichkeit, ein eigenes Leben zu führen, beginnt im 16. Jahrhundert, und das waren die Gefahren, die Gegner wie die Ziele noch andere.

Meister der Kardanwelle

Der italienische Arzt, Philosoph und Mathematiker Geronimo Cardano war Erfinder einer Regel zur Auflösung von Gleichungen dritten Grades und einer unabhängigen Aufhängvorrichtung für Kompass und Uhren (die Kardanwelle ist nach ihm benannt). In seinem letzten Lebensjahr schrieb er eine Autobiographie, die noch heute zu den Meisterwerken des Genus zählt. Seine Karriere machte Cardano als Astrologe. Die Kunst, Sterne und Planeten auf Biographien oder den voraussichtlichen Ausgang verschiedenster Vorhaben zu beziehen, hatte Konjunktur. Herrscher und Päpste bedienten sich der Hinweise, die die Sterndeuter für wichtige Entscheidungen und durchaus auch für die richtige Lebensführung bereiteten.

Das Universum bestand aus zwei Teilen: aus der höheren, unwandelbaren Welt der himmlischen Sphären, die sich um die Erde drehten, und der niedrigeren, vergänglichen Welt der vier Elemente. Was vollendet ist, ist auch von höherem Rang und regiert deshalb das Wandelbare, die unreine Materie. Die Geschöpfe der niedrigeren Welt tanzten, waren auch unvollkommen, zu den ewigen Sphärenklängen. Das Taligentgebot der Astrologie war ein weites Feld: vom Lauf der Weltgeschichte über den des Lebens, von den Erfolgsaussichten einer medizinischen Behandlung über die einer Eheschließung oder eines Geschäftes - zu allem wurde der Astrologe befragt. Der wiederum mußte, um Erfolg zu haben, den Spagat vollbringen zwischen größter Vorsicht bei seinen Vermutungen, um nicht in Ungnade zu fallen, und gewagten Thesen, um aufzufallen. „Auf höchstem Niveau kam antiken wie frühmodernem Astrologen eine ganz ähnliche Funktion zu wie im 20. Jahrhundert den Volkswirtschaftlern... Wie der Volkswirtschaftler so erwies sich der Astrologe in der Praxis als durchaus willig, dem bräutigam mächtiger Auftraggeber nachzugeben. Und wie der Volkswirtschaftler, so mußte auch der Astrologe in der Regel feststellen, daß die Ereignisse seiner Prognosen Lügen straften und erhielt in Würdigung seiner wissenschaftlichen Leistungen, die sich so glänzend bewährt hatten, einen höheren und besser bezahlten Posten.“

Cardano zeichnet sich aus durch unbedingtes Tätigsein am eigenen Schicksal. Statt sich auf den Einfluß der Gestirne zu verlassen, betätigt er sich mit größter Aktivität und Geschicklichkeit an der Gestaltung seines Aufenthalts auf Erden. Was Ulrich Beck für unsere Zeit als „neue Unmittelbarkeit von Individuum und Gesellschaft“ beschreibt, scheint in der Zeit Cardanos zu beginnen, und er ist ein hervorragendes Beispiel für einen Bewohner jener Schwellenepoche. Mit dem alten Handwerkzeug der Astrologie versehen arbeitet er nach neuesten Methoden, ein Elitist - auf eigenes Risiko, versteht sich -, der Karriere macht in einer Zeit, die keine Spezialisten mehr braucht. Einer, der nicht so gut beherrscht wie soziale Reflexion, wie den Kompromiß mit den Umständen, was sollte der andere werden als Astrologe. Das Buch beschreibt Cardanos lebenslange Bemühen, „in den Sternen jene Ordnung zu finden, die, wie er meinte, unter dem offenkaren Chaos seines Lebens und der Welt, in der dieses Leben seinen Ort hatte, verborgen liegen mußte.“

„Wer näheren Bekanntheit mit Cardano sucht, muß heute wie schon damals Eliten in Kauf nehmen“, schreibt Grafton. Risiken, wie sie Cardano auf sich zu nehmen bereit war, Er wurde in eine Gesellschaft und dort in einen Stand hineingeboren, der von ihm das erwartete, was auch unsere bürokratische Gesellschaft verlangt: geistliche Organisation, Kreativität und Aktivität bei der Gestaltung des eigenen Lebenslaufes. Da greift einer nach den Sternen des eigenen Lebens. Die Astrologie war ihm in mancher Hinsicht dienlich. Zum einen war sie als anerkannt empirische Wissenschaft die mögliche Leiter einer Karriere, zum anderen vermittelte die erkannte Ähnlichkeit zwischen den Konstellationen am Himmel und denen auf der Erde zum eigenen Vorteil verwertbare Menschenkenntnis, ein Wissen, das - so vage es heute wirken mag - auch gewinnbringend geltend gemacht werden konnte. Wieviel Inszenierung zu dieser Machtausübung dank scheinbar besseren Wissens gehört - und sei es nur des Wissens um die Wege der Macht -, wissen wir auch heute noch sehr gut. Dem Fälscher und Betrüger im alltäglichen (wissenschaftlichen) Berufsleben, der mit Hilfe einer Fälschung einzudringen versucht in den heiligen Bereich autoritativer Schriften - sei es um die eigene Bedeutung dort aufgehoben zu wissen, sei es um sich mit Hilfe von Wissen und Stil einen Witz zu erlauben - galt das erste deutsch erschienene Buch Graftons, *Fälscher und Kritiker*.

Viel Introspektion

„Aus der antiken autoritären Tradition der Astrologie mit all ihren starren Schablonen, anhand deren menschliche Charaktere und Handlungen klassifiziert und beurteilt wurden, konnte dennoch eine Kunst der sensiblen, präzisen Beschreibung und Beurteilung des zutiefst Menschlichen hervorgehen. Diese besondere ganz aus dem Geist des 16. Jahrhunderts geborene Form der Astrologie konnte durchaus den Anspruch erheben, empirische Forschungen zu sein. Die Tiefen der Ich zu treten, Sie verlangte intensive Übung in der Kunst der Charakterbeurteilung und viel Introspektion und erregte zu innovativen Experimenten bei der Darstellung und Dokumentation der Untersuchungsergebnisse. Mindestens ebenso konsequent wie jene Zeitgenossen vom Schlag Machiavelli, die auf der Suche nach der effektiven Wahrheit der Dinge Politik und Geschichte einer genauen Analyse unterzogen, und wie die Stoiker, die im Schreiben ihr Ich disziplinierten, arbeiteten die Astrologen und ihre Klienten an einem grundlegenden und zutiefst modernen Projekt.“

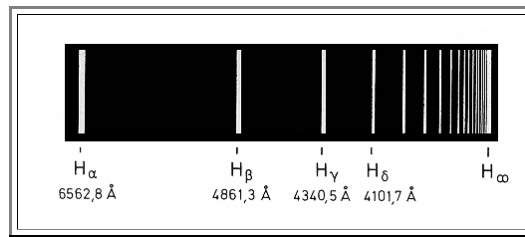
Das von Peter Knecht hervorragend übersetzte Buch ist so spannend, daß man heimlich ständig damit rechnet, Grafton habe einiges dazufunden. Cardanos Kosmos bringt uns seinen vor 500 Jahren verstorbenen Helden so nahe, wie er es wohl auch ist. OLIVER VOGEL

ANTHONY GRAFTON: *Cardano Kosmos. Die Welten und Werke eines Renaissance-Astrologen vom Spätmittelalter bis zur Amerikanischen Revolution*. Berlin Verlag 1999. 416 Seiten, 35,80 Mark.

Balmer Spektrum: Experiment und Bohrsche Theorie

Illustration

Balmer entdeckte **1885**, daß auf die drei bereits bekannten Emissionslinien des Wasserstoffs im Sichtbaren ($H_{\alpha}, \beta, \gamma$) noch eine ganze Serie von Linien im **Ultravioletten** folgte. Das Spektrum sah so aus:



- Balmer erkannte, daß hier ein Bildungsgesetz zugrunde liegen muß, das auch gar nicht schwer empirisch zu ermitteln war. Für die **Wellenzahl k** der Linien gilt:

$$k = \frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- mit λ = Wellenlänge, **R = Rydbergkonstante = $109677,5810 \text{ cm}^{-1}$** (man konnte schon damals sehr genau messen), und **$n > 2$** ganzzahlig.
- Ein einfaches Bildungsgesetz - aber warum? Und was bestimmt den Zahlenwert der Rydbergkonstanten? Niemand konnte diesen experimentellen Befund nachvollziehen, bis **1913** Bohr sein Modell postulierte.
- Welche Sensation das auslöste, kann man ein bißchen nachvollziehen beim Betrachten der folgenden Tabelle.

Liniename	n_2 ($n_1 = 2$)	λ beobachtet Å (10^{-10}m)	λ berechnet Å (10^{-10}m)
H α	3	6562,793	6562,78
H β	4	4861,327	4861,32
H γ	5	4340,466	4340,45
H δ	6	4101,738	4101,735
H ϵ	7	3970,075	3970,074
H ζ	8	3888,052	3888,057
H η	9	3853,387	3835,397
H θ	10	3797,900	3797,910
H ι	11	3770,633	3770,634
H χ	12	3750,154	3750,152
H λ	13	3734,371	3734,372
H μ	14	3721,948	3721,948
H ν	15	3711,973	3711,980

1. Hauptsatz der Materialwissenschaft



Es gibt keinen 1. Hauptsatz der Materialwissenschaft im strengen Sinne. Scherzhaft aber lautet er wie folgt:

Mit Gewalt kann man alles kaputtmachen

Illustration

Dieser Hauptsatz ist unbestreitbar richtig (in der Materialwissenschaft befassen wir uns nicht mit den *Elementarteilchen*, wo die Gültigkeit nicht ganz so klar ist).

- Der Grund dafür liegt letztlich darin, daß es immer möglich ist, Elektronen aus einem Atom oder aus einem Verbund von Atomen - einem Material - gewaltsam zu entfernen. Dabei ändert sich immer was - und kaputtmachen heißt immer, daß sich etwas ändert.

Der Umkehrschluß gilt nicht! Man kann auch mit Gewalt bzw. noch so großer Anstrengung, nicht immer etwas heil machen.

- Das hat einen sehr tiefen Grund: Es gibt nämlich (immer) sehr viel mehr Zustände eines Systems - z.B. eines Bierglases - die als *kaputt* definiert werden können (es ist egal, wie viele Scherben in welchen Formen vorliegen), aber immer nur *einen* Zustand, den wir als heil betrachten würden.
- Gewaltanwendungen auf einen Haufen Scherben wird deshalb mit hoher Wahrscheinlichkeit nur einen anderen Haufen Scherben erzeugen, und nur selten ein heiles Glas.

Diese Betrachtung läßt sich quantifizieren. Wir müssen anstelle eines Bierglases nur einen Haufen Buchstaben (inkl. Leerzeichen usw.) nehmen, z.B. alle Zeichen in diesem Hyperskript.

- Gewaltanwendung auf einen Papiausdruck (= in kleine Schnipsel zerreißen) macht das Skript sicher kaputt.
- Die Wahrscheinlichkeit, daß Gewaltanwendung (z.B. kräftiges Schütteln der Schnipsel) das Skript wieder entsteht läßt, kann genau berechnet werden.
- Dabei taucht eine neue fundamentale Größe auf: Die **Entropie** des Systems, die uns noch oft beschäftigen wird. Sie mißt die *Unordnung*, sozusagen den Grad der Kaputtheit, des Systems.

Der erste Hauptsatz der Materialwissenschaft sagt dann in anderer Form nur, daß es mit Gewaltanwendung (= Energiezufuhr) immer möglich ist, die Entropie eines Systems zu erhöhen.

- Damit liegt er in der Nähe des so ungeheuer wichtigen (und seriösen) [2. Hauptsatzes der Thermodynamik](#).

Faustregel für Bindungsenergien

Illustration

Es ist immer nützlich sich einige wenige Bezugsgrößen zu merken. Bei Bindungsenergien brauchen wir nur *eine einzige Zahl* zu wissen:

- *Die Energie des sichtbaren Lichtes liegt bei ca. 1 eV!*

Damit haben wir eine Bezugsgröße, denn wir wissen:

- Alles Leben kommt vom Licht, es treibt die Photosynthese in den Pflanzen.
- Da die wichtigen organischen Reaktionen bei Raumtemperatur laufen, entspricht **1 eV** damit einer Bindungsenergie, die bei Raumtemperatur gerade noch hält.
- Bindungsenergien die größer sind als **1 eV** sind damit kräftige Bindungen, die erst bei hoher Temperatur "aufgehen".
- Bindungsenergien die kleiner sind als **1 eV** sind schwache Bindungen die nur bei tiefen Temperaturen halten.

Die Schrödingergleichung

Illustration

- Falls Sie das erste Mal mit der Schrödingergleichung konfrontiert wurden sollten Sie folgendes tun:
- In Demut niederknien, und darüber meditieren, daß in den wenigen bits die es braucht um diese Gleichung niederzuschreiben, plus den paar kilobits für die erklärende Prosa drumherum, ein großer Teil dessen steckt, was vom 20. Jahrhundert *für alle Zukunft* für all die Lebewesen bleiben wird, die unsere paar kilobits entschlüsseln können.
 - Ähnliches gilt für ein paar weitere Gleichungen (z.B. die Relativitätstheorien).
 - Alles was sonst noch zwischen **1900** und **2000** geschah - diverse Kriege, die sexuelle Revolution, die Rückkehr der Jedi Ritter und Joschka Fischers Turnschuhe (s.u.), wird mit wachsendem zeitlichem Abstand bis zur Unsichtbarkeit verblasen.
 - Die Schrödingergleichung (inkl. ihrer Erweiterungen und Verallgemeinerungen) aber wird bleiben. Und alles was aus ihr folgte (und noch folgen wird) auch.
 - Das ist der kleine Unterschied zwischen *universell* gültigen Gesetzen (= überall im Universum zu jeder Zeit gültig) und *regionalen* juristischen, philosophischen, soziologischen, theologischen, wirtschaftlichen, usw. Gesetzen, die falls überhaupt, immer nur auf Teilen *eines* Planeten *einer* Galaxis für begrenzte Zeit gültig sind.

Da Joschka Fischers Turnschuhe heute (2003), also wenige Jahre nachdem dieser Modul entstand, schon nicht mehr unbedingt allen geläufig sind, hier ein Internetauszug

Turnschuhe im Museum:

Es ist eine lange Wegstrecke, nicht nur einer Partei, sondern der gesamten deutschen Gesellschaft. Dies wird etwa klar, wenn man die Bilder vom Einzug der ersten grünen Bundestagsabgeordneten Revue passieren lässt. Vollbart, Strickpulli, abgewetzte Jeans und Sonnenblumen; das typisch grüne Outfit war geeignet 1983 im ansonsten von Krawatte und Kostüm dominierten 'hohem Haus' eine Kulturrevolution auszulösen. Knapp zwanzig Jahre später gilt oder 'Ober-Grüne' Joschka Fischer als der am besten bekleidete Minister, während es unter hochrangigen Politikern aller Couleur nicht mehr als ehrenrührig gilt, ab und zu auch im Freizeitlook zu erscheinen. Die Turnschuhe, die Fischer anlässlich seiner Vereidigung zum weltweit ersten grünen Minister trug, stehen heute übrigens im Museum.

Soweit kann der Mensch es bringen!

Beweis der dichtesten Kugelpackung

 Nachstehend ein Artikel aus der Süddeutschen Zeitung vom **Okt. 1998** zur dichtesten Kugelpackung

Advanced

Die Mathematik der Orangen

Keplers Vermutung über dichtes Packen von Kugeln bewiesen

Wie lassen sich Orangen platzsparend schichten? Oder in der Sprache der Mathematik: Welches ist die dichteste Packung von Sphären im dreidimensionalen Raum? Die Antwort ist kein Geheimnis, sie kann an jedem Obststand besichtigt werden. Orangenpyramiden füllen den Raum zu etwa **74** Prozent mit Frucht, die Luft dazwischen macht nur **26** Prozent aus. Daß diese bewährte Stapelmethode aber auch im streng mathematischen Sinne die beste ist, hat Thomas C. Hales von der Universität von Michigan bewiesen (Nature, Bd. 395, S. 435, 1998).

Schon **1611**, damals ging es noch um die Lagerung von Kanonenkugeln, war Kepler überzeugt von der erwähnten Methode. Einen strengen Beweis konnte aber auch der geniale Physiker nicht liefern, und seitdem heißt seine Überzeugung die "**Keplervermutung**". Im Jahr **1900** adelte David Hilbert die Vermutung, indem er sie als eine der wichtigen offenen Fragen auf dem Internationalen Kongreß der Mathematiker vortrug. Zum Beweis brauchte es stolze **387** Jahre; er ist deshalb so schwierig, weil es nicht um das dichte Packen von vier oder zehn Kugeln geht, sondern um unendlich viele. Und da ist es zwar höchst unwahrscheinlich, aber dennoch schwierig auszuschließen, daß ein leichtes Abweichen von der Orangenmethode nicht doch günstig sein könnte.

Schon zweimal, **1975** und **1993**, legten Fachleute Beweise vor, die sich später als unvollständig erwiesen. Hales Beweis bringt es auf enorme **250** Seiten. Zwar bestehen in der Fachwelt keine Zweifel an der Gültigkeit des Beweises, aber er ist noch nicht begutachtet oder in einer Fachzeitschrift erschienen. Hales hat seine Überlegungen jedoch über das Internet zugänglich gemacht (www.math.lsa.umich.edu/~hales). *)

Noch etwas ordnet den Beweis einer erst seit wenigen Jahren bestehenden Gattung zu: Er benutzt an zentraler Stelle ein umfangreiches Computerprogramm. Während herkömmliche Beweise den Mathematikern beim Verstehen noch ein Aha-Erlebnis bescherten, so ist das im Falle der Keplervermutung anders. Der Computer führt selbsttätig eine unüberschaubar große Anzahl an Fallunterscheidungen durch, ein Mathematiker kann da nur noch die Vollzugsmeldung zur Kenntnis nehmen und die Richtigkeit des Programms überprüfen. Selbst wenn sich noch eine Lücke im Beweis auftun sollte – die Richtigkeit der Vermutung steht seit je außer Zweifel; fragen Sie ihren Obsthändler...

JOHANNES LENHARD

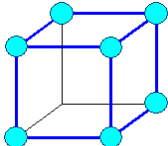
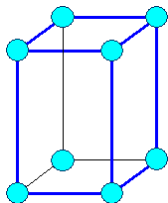
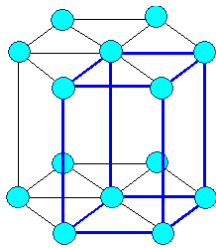
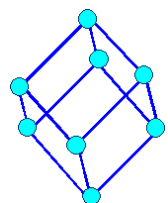
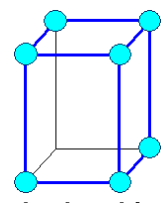
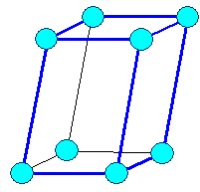
Süddeutsche Zeitung vom **Okt. 1998**

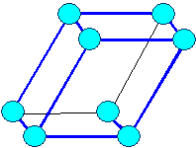
*) jetzt unter <http://www.mathematics.pitt.edu/person/thomas-hales>

Ebenenabstand in nichtkubischen Gittersystemen

Advanced

Die Abstände zwischen benachbarten Ebenen mit denselben **Miller-Indices** berechnen sich wie folgt:

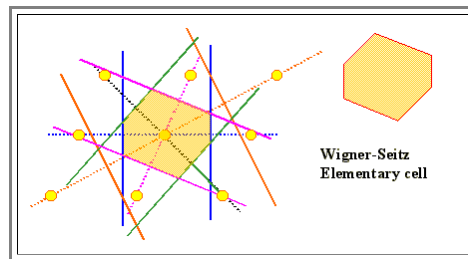
Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Zugehöriges unzentriertes Bravaisgitter (gelegentlich nur "sichtbare" Gitterpunkte eingezeichnet)	Achsenwinkel
		Abstand zweier Ebenen mit Miller-Indices (hkl)
Kubisch $a_1 = a_2 = a_3$	 kubisch-primitiv	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$
Tetragonal $a_1 = a_2 \neq a_3$ $a_3 = c$	 Tetragonal-primitiv	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
		$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + a^2/c^2 \cdot l^2)^{1/2}}$
Hexagonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	 Hexagonal (EZ ergänzt um hex. Symmetrie zu zeigen)	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
		$d_{hkl} = \frac{a}{\{4/3(h^2 + hk + k^2) + a^2/c^2 \cdot l^2\}^{1/2}}$
Rhomboedrisch $a_1 = a_2 = a_3$	 Rhomboedrisch	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
		$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + l^2 + k^2)\sin^2\alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2\alpha - \cos\alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)}$
Orthorhombisch $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	 Orthorhombisch-primitiv	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
		$d_{hkl} = \frac{1}{\{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2\}^{1/2}}$
Monoklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	 Monoklin-primitiv	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
		$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2\sin^2\beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2\sin^2\beta} - \frac{2hl\cos\beta}{ac\sin^2\beta}$

<p>Triklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$</p>		$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
		<p>Volumen EZ</p> $V = abc \cdot (1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha \cdot \cos\beta \cdot \cos\gamma)^{1/2}$ <p>Parameter</p> $S_{11} = b^2c^2\sin^2\alpha$ $S_{22} = a^2c^2\sin^2\beta$ $S_{33} = a^2b^2\sin^2\gamma$ $S_{12} = abc^2 (\cos\alpha \cdot \cos\beta - \cos\gamma)$ $S_{23} = a^2bc (\cos\beta \cdot \cos\gamma - \cos\alpha)$ $S_{13} = ab^2c (\cos\gamma \cdot \cos\alpha - \cos\beta)$ <p>Abstand</p> $\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} \cdot (S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl)$

Wigner - Seitz - Elementarzelle

Advanced

- For a given lattice, there is a simple way of constructing an unique elementary cell, avoiding all the difficulties with primitive and non primitive elementary cells, Bravais lattices that show all the symmetry or only parts, and so on.
 - The catch is, you may loose everything that makes a lattice special. The resulting elementary cells may appear downright ugly.
 - That's why they are rarely used as long as we look at crystal lattices in normal space. But whenever we consider *electronic properties*, we will construct lattices in some other space - in particular wave vector or momentum space - and that's when we use *Wigner - Seitz cells*, as they are called, exclusively.
- Well - here is the recipe:
 - Choose a zero point of your lattice.
 - Draw lines from your zero point to all neighboring lattice points; take as many as you want - nearest neighbors, second-nearest neighbors, etc.
 - Draw a plane (two-dimensional a line), that exactly bisects all of your lines at a right angle.
- That's it. A subset of all your planes will form some closed body, and that is your Wigner Seitz elementary cell, That it is an **EZ** is easy to see: just repeat it all over space - it will produce your crystal if you put your base - the atoms - at the right positions inside your Wigner-Seitz **EZ**.
 - Below it is done for a two-dimensional lattice.



Quasikristalle I

Advanced

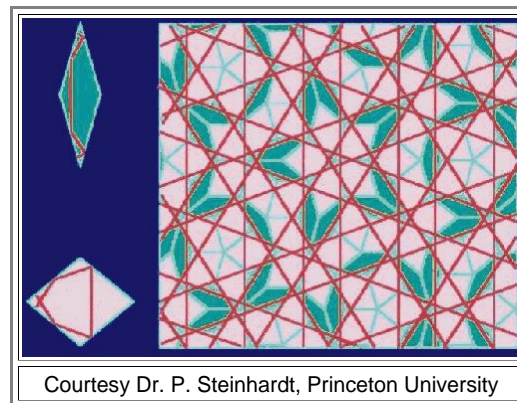
Ein richtiger Kristall ist immer streng periodisch. Ein Baustein - die **Basis** - wiederholt sich in strenger Sequenz; es ist nicht unähnlich wie der Bau einer (dicken) Mauer mit Ziegelsteinen, die immer dieselbe Form haben.

- Man kann auch zwei oder mehr **verschiedene** Ziegelsteine haben (zweidimensional wären es **Fliesen**); die Aufgabe ist immer, den Raum oder die Fläche **komplett** zu füllen, und das geht nur - so dachte man - in streng periodischen Arrangements.

Bis dann **1984** am National Institute of Standards and Technology in Gaithersburg, Md., USA, der Gastforscher Dan **Shechtman** vom Israel Institute of Technology in Haifa zu seiner Verblüffung fand, daß eine **Al - Mn** Legierung, die er eigentlich als kristallin kannte, die konventionellen Regeln der Kristallographie **nicht** befolgte - aber trotzdem definitiv nicht amorph war.

Geglaubt hat man es ihm zunächst nicht; er wurde lange und heftig angefeindet. 2011 hat er dann aber (endlich) den Nobelpreis für Chemie (!) bekommen. [Dieser Link](#) führt zu ein paar lesenwerten Details der MRS (Materials Research Society).

- Im Rasterelektronenmikroskop waren geometrische Körper mit glatten Oberflächen zu sehen - typisch für Kristalle - aber sie hatten eine **fünfstellige Symmetrie**!
- Vom normalen kristallinen Aufbau verschieden war, daß der Abstand von (für sich kristallinen) Atomreihen nicht fest war (wie für einen richtigen Kristall), sondern unsystematisch zwischen zwei festen Werten variierte. Zweidimensional kann man sich das etwa so vorstellen wie nachfolgend gezeichnet

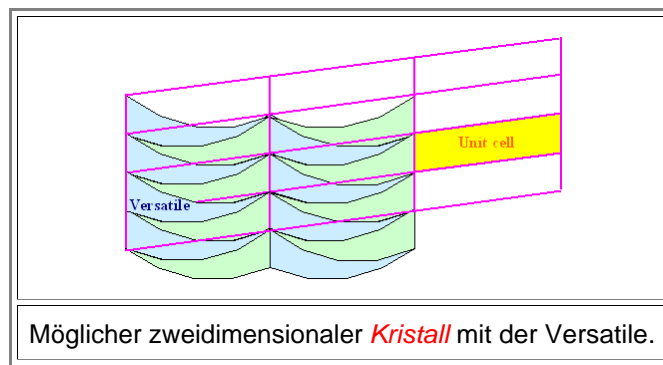


Diese Muster mit typischen fünfzähligen "Sternen" kann man bekommen, wenn man die links dargestellten Fliesen immer nur so kombiniert, daß keine Brüche in den Linien auftreten.

- Das sich dann ergebende Farbmuster ist auch ziemlich beeindruckend. Insbesondere sieht man sofort die vielen schönen Fünfecke, die eine **fünfstellige Symmetrie** vortäuschen, die aber gar nicht da ist.
- Der reinen Mathematik war das nicht so neu. Sie hatte schon viel früher die Frage beantwortet, ob die Ebene mit einer **endlichen** Anzahl von verschieden geformten Fliesen **einerseits** vollständig bedeckt werden konnte, **andererseits** in **nichtperiodischer** Weise.
- Die Antwort war stark davon abhängig, wie die Frage gestellt war. Suchte man **1.** Fliesen, die **sowohl** periodisch **als auch** nichtperiodisch eine Fläche vollständig bedecken konnten, **oder 2.** Fliesen, die **nur** nichtperiodische Muster erlaubten?
- Zur **ersten** Frage gibt es viele Lösungen, die eleganteste ist die "**versatile Fliese**" (**versatil** = wendig, beweglich, vielseitig), sie heißt auf auf Englisch passend "**Versatile**" (tile = Fliese).
- Die zweite Frage führt ziemlich schnell in die **tieftsten Abgründe** der Mathematik.

Die **dreidimensionalen** real beobachteten Quasikristalle kann man sich nun immer entlang den folgenden zweidimensionalen Analogien aufgebaut denken - auch wenn's schwer fällt.

- Die nachfolgenden Bilder zeigen periodische und aperiodische Strukturen, die beide mit der "Versatile" möglich sind. Sie sind Illustrationen aus dem Buch "**The Emperor's new Mind**" von **Roger Penrose** nachempfunden; dort finden sich mehrere vollständige und schönere Bilder. Die "versatile Fliese", die "Versatile" ist dabei das einzelne sichelförmig gebogene Dreieck wie dargestellt
- Mit der **Versatile** läßt sich zunächst ein simpler Kristall darstellen:



- Mit Variationen und Fortsetzungen der hier gezeigten Anordnung lassen sich aber auch mehrere Arten von Spiralen darstellen, die den "Boden" lückenlos bedecken, aber ganz sicher keine Translationssymmetrie haben.

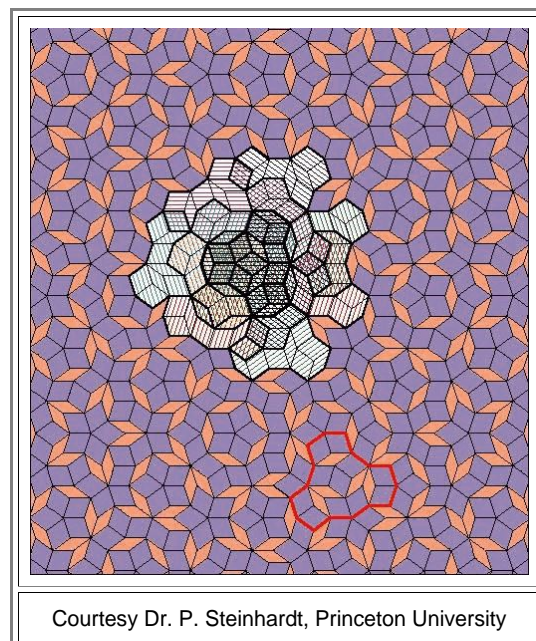


Will man nur Fliesen zulassen, die *ausschließlich* nichtperiodische Muster ergeben, wird die Lösung komplizierter.

- **Berger** konnte **1966** zeigen, daß es zwar einen Satz Fliesen gab, der *nur* nichtperiodische Muster erzeugte, aber dieser (mathematische) Fliesensatz hatte **20 426** verschiedenen Fliesen. Er wurde zwar schnell auf "nur" **104** reduziert, aber praktische Bedeutung hatte das nicht.

Dann kam **1974** Roger **Penrose** von der Universität Oxford und zeigte, daß man mit *zwei* Fliesen auskommen kann - einem dicken und einem dünnen Rhombus.

- Mit den beiden **"Penrose Fliesen"** kann man *jede* Ebene *nur* nichtperiodisch bedecken falls man sich an bestimmte Regeln hält, die z.B. durch die Farbe der Fliesenränder vorgegeben sind (sonst wird's periodisch).
- Das sieht dann so aus wie unten gezeigt. Das rotumrandete "Fliesencluster" unten rechts zeigt eine häufig auftretende Überstruktur. Im Zentrum des Bildes ist gezeigt, wie sich der zweidimensionale Quasikristall auch durch häufiges Überlappen der hervorgehobenen Überstruktur darstellen läßt.



Die "**Penrose tiles**" sind nicht nur für die Materialwissenschaft der Quasikristalle wichtig, sie können auch sehr schön einen fundamentalen mathematischen Satz demonstrieren (der von Penrose immer wieder bemüht wird, um das [menschliche Bewußtsein](#) unter die natürlichen Phänomene zu subsummieren):

- **Satz:** Es gibt mathematisch *eindeutige* Fragen, die auch eine *eindeutige* Antwort haben, wobei diese Antwort aber prinzipiell nicht berechenbar ist.

■ Auf unser Problem übertragen heißt das: Es läßt sich in *voller Strenge* mathematisch beweisen, daß es *keine* Möglichkeit gibt (auf mathematisch heißt das: keinen endenden Algorithmus), um zu entscheiden, ob ein gegebener Satz von Fliesen die Ebene vollständig ausfüllen kann (periodisch oder nichtperiodisch; ist egal).

- Und das, *obwohl* eine eindeutige Antwort existiert; sie ist entweder ja oder nein. Damit ist zwar nicht ausgeschlossen, daß man durch Probieren oder Intuition für einen gegebenen Fliesensatz die Antwort findet; aber grundsätzlich ist das nicht in systematischer Weise für alle beliebigen Sätze von Fliesen möglich.

■ Seit Shechtman's aufregender Entdeckung, hat die Internationale der Materialwissenschaftler viele Legierungen gefunden (nie einen Elementkristall), die ähnliche Strukturen aufweisen und die als *Quasikristalle* bezeichnet werden. Manche dieser Quasikristalle haben Eigenschaften, die sich von denen ihrer kristallinen Brüder mit derselben Zusammensetzung stark unterscheiden. Sie sind oft härter, schlechter stromleitend und haben Oberflächen, auf denen (wie beim Teflon) praktisch nichts haftet.

- Anwendungen dafür gibt es *noch* nicht. Die antihaft-beschichtete Bratpfanne, bei der die Schicht auch nicht schnell wieder abgeht wäre möglich, aber das Image eines derartigen Produktes ist von der Teflonpfanne gründlich versaut - hier kommt mal wieder die [Psychologie](#) rein.

- Aber was nicht ist, kann noch werden. Das Studium der Quasikristalle hat nicht nur die Materialwissenschaft, sondern auch die Mathematik befruchtet. Früher oder später wird das Früchte tragen.

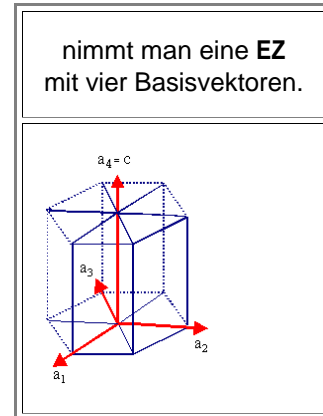
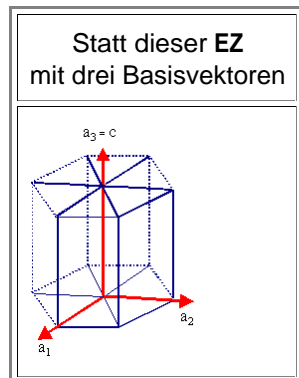
■ Damit ist aber noch lang nicht alles grundsätzliche über Quasikristalle gesagt, denn die Geschichte geht weiter. Wer wissen möchte, warum Quasikristalle in einer *sechsdimensionalen* Welt *richtige* Kristalle sind, betätigt den Link ["Quasikristalle II"](#)

Vierer-Indizierung im hexagonalem Gitter

Viererindizierung von Richtungen

Advanced

- Zunächst definiert man einen **zusätzlichen** Basisvektor, um der Symmetrie der hexagonalen Basisebene besser gerecht werden zu können.



- Natürlich kann man nun die Indizes nicht mehr ganz unabhängig wählen.
- Hat man im **Dreier**-System eine Richtung mit $\langle UVW \rangle$ bestimmt, wird im **Vierer**-System dieselbe Richtung jetzt mit $\langle uvtw \rangle$ beschrieben.
 - Die **neuen** "Vierer"-Indizes können aus den alten "Dreier"-Indizes wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned} u &= 1/3 (2U - V) \\ v &= 1/3 (2V - U) \\ t &= -(u + v) \\ w &= W \end{aligned}$$

- Achtung! Bei t stehen absichtlich "kleine" Buchstaben. Diese Formeln kann sich jeder selbst ableiten! Aber aufpassen! Im ["Askeland"](#) hat sich z.B. bei diesen Formeln ein Fehler eingeschlichen.
- Kristallographisch gleichwertige Richtungen haben mit der Viererindizierung dieselbe generelle Indizierung, wie in einer [Übungsaufgabe](#) gezeigt wird.

Viererindizierung von Ebenen

- Die Indizierung von **Ebenen** im Viersystem ist sehr einfach:
- Die **Dreier**-Indizierung (hkl) einer Ebene geht über in die **Vierer**-Indizierung $(hkil)$; d.h. die drei alten Indizes ändern sich **nicht** und der neue Index i berechnet sich simpel aus der Bedingung

$$h + k + i = 0$$

- Symmetrien sind im Viersystem klar erkennbar:
- Alle **Richtungen** mit gleichen Viererindizes sind kristallographisch äquivalent.
 - Alle **Ebenen** mit gleichen Viererindizes sind kristallographisch äquivalent.
- Zu beachten ist aber, daß der Vektor $\langle uvtw \rangle$ im allgemeinen **nicht** senkrecht auf der Ebene $(uvtw)$ steht.

Pseudoreziprokes Gitter im Viersystem

Für später (Einführung in die Materialwissenschaft II) gehen wir gleich noch einen Schritt weiter und betrachten auch das sogenannte **reziproke Gitter**

- **Hier** muß man dazu nur wissen, dass das reziproke Gitter aus dem realen Gitter abgeleitet wird, indem man Vektoren mit Komponenten **h, k, l** definiert, die senkrecht auf den Ebenen **{hkl}** des realen Gitters stehen und eine Länge haben, die proportional zum Abstand dieser Ebenen sind - und dass das reziproke Gitter für viele Zwecke wichtiger werden wird als das reale Gitter.

Ein reziprokes Gitter mit **vier** Komponenten der Basis- und Translationsvektoren ist aber, wenn man genau hinschaut, grundsätzlich nicht definierbar; man bekommt unlösbare Probleme sobald man die **formale Definition** bemüht.

- Wir betrachten also zunächst das reziproke Gitter zu den **drei** Basisvektoren **a₁**, **a₂** und **c** des hexagonalen Gitters.
- Diese Basisvektoren des reziproken Gitters seien **g₁**, **g₂** und **g₃**. Sie ergeben sich für das hexagonale Gitter zu

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= \frac{2 \cdot (2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{3a^2} \\ \mathbf{g}_2 &= \frac{2 \cdot (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)}{3a^2} \\ \mathbf{g}_3 &= \frac{\mathbf{c}}{c^2} \end{aligned}$$

Ein so definierter reziproker Gittervektor steht **per definitionem** senkrecht auf der Ebene mit den gleichen Dreier-Indizes.

- Will man auch im reziproken Gitter die Vierer-Indizierung übernehmen, muß ein **pseudoreziprokes Gitter** so eingeführt werden, daß in ihm ein pseudoreziproker Gittervektor mit der Indizierung **(hkil)** senkrecht auf der Ebene **(hkil)** des Raumgitters steht.
- Da nun die Ebene **(hkl)** dieselbe ist wie die Ebene **(hkil)**, besteht die Aufgabe darin, den Vektor **G = hg₁ + kg₂ + lg₃** auszudrücken als

$$\mathbf{g} = h\mathbf{g}'_1 + k\mathbf{g}'_2 + i\mathbf{g}'_p + l\mathbf{g}'_3$$

- Wobei die gestrichenen Vektoren die Basisvektoren des **pseudoreziproken** Gitters sind. Der Basisvektor **g'_p** ist der vierte und eigentlich überflüssige Vektor.
- Gleichzeitig gilt immer die Nebenbedingung **h + k + i = 0**.

Damit ist das pseudoreziproke Gitter definiert, es gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{g}'_1 &= \frac{2}{3a^2} \cdot \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{g}'_2 &= \frac{2}{3a^2} \cdot \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{g}'_p &= \frac{2}{3a^2} \cdot \mathbf{a}_3 = -(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \\ \mathbf{g}'_3 &= \frac{1}{c^2} \cdot \mathbf{c} \end{aligned}$$

Das **pseudoreziproke** Gitter ist also mit dem realen Gitter bis auf die Länge der Basisvektoren identisch.

- Der große Vorteil des pseudoreziproken Gitters ist, daß sich in ihm Produkte von Vektoren des realen und des reziproken Gitters besonders einfach ausrechnen lassen (eine Aufgabe, die häufig vorkommt).
- Ist ein Translationsvektor des realen Gitters in der Viererindizierung gegeben durch $\underline{r} = \langle uvtw \rangle$ und ein Vektor des pseudoreziproken Gitters durch $\underline{g} = (hkl)$, dann gilt für das Skalarprodukt

$$\underline{r} \cdot \underline{g} = hu + kv + it + lw$$

- d.h. man kann rechnen wie in einem cartesischen System.

Produkte zwischen Vierervektoren derselben Sorte sind etwas komplizierter, es gilt: Für

$$\underline{r}_1 = \langle u_1 v_1 t_1 w_1 \rangle$$

$$\underline{r}_2 = \langle u_2 v_2 t_2 w_2 \rangle$$

- ist das Skalarprodukt (mit der Abkürzung $\lambda = (2/3)(c/a)^2$):

$$\underline{r}_1 \cdot \underline{r}_2 = \frac{3a^2}{2} \cdot (u_1 \cdot u_2 + v_1 \cdot v_2 + t_1 \cdot t_2 + \lambda^2 \cdot w_1 \cdot w_2)$$

Ähnlich im pseudoreziproken Gitter. Für

$$\underline{g}_1 = (h_1 k_1 i_1 l_1)$$

$$\underline{g}_2 = (h_2 k_2 i_2 l_2)$$

- ist das Skalarprodukt

$$\underline{g}_1 \cdot \underline{g}_2 = \frac{3a^2}{2} \cdot (h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + i_1 \cdot i_2 + \lambda^{-2} \cdot l_1 \cdot l_2)$$

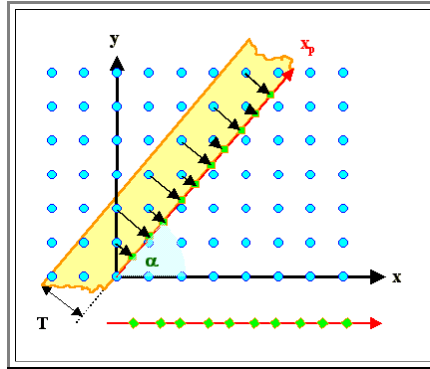
Quasikristalle II

This module will be in English because it is also used for other Hyperscripts.

Advanced

One of the more exciting (or frightening, depending on one's perspective to science) developments in understanding quasicrystals was the insight that quasicrystals can be constructed by projecting a *perfect* lattice in *6-dimensional space* onto a properly chosen *3-dimensional* subspace (which is the kind of space you and I know).

The gist of this outrageous statement is actually far easier to understand than it appears at first. For that we look at a simple analogue: We project a *perfect 2-dimensional lattice* on a *1-dimensional subspace*. How this is done is shown in the figure below.



Starting from a simple *2-dimensional* cubic lattice, we draw a straight line x_p at an angle α to the x -direction. The decisive point is that **tan** α must be an *irrational* number, e.g. $(5)^{1/2}$ or $\pi/3$ or whatever. This makes sure that x_p will *not* touch another lattice point *ever*.

We then define an area (yellow) by drawing a line parallel to x_p at some distance T , which can be an arbitrary number.

Some lattice points will now be found within the yellow area, we project their position onto x_p .

The sequence of points obtained that way (shown at the bottom as the sequence of green "diamonds") is - by definition if you think about it - aperiodic; it will *never repeat*.

But it is not completely random either. There are only two different distances between points, their sequence just does not follow a periodic pattern.

We have actually produced a *one-dimensional quasicrystal*.

Now let's take a *six-dimensional space* and construct a cubic primitive lattice. No mathematician has the slightest problem doing that - you simply get a "hypercube" elementary cell with **64** corners and so on.

Now let's take a regular three-dimensional space. We make sure that the three-dimensional space is oriented relative to the six-dimensional space in such a way, that the six base vectors of the hypercube are projected onto the three-dimensional space with the fivefold symmetry of an *icosahedron*. (An icosahedron is one of those regular "eders" with triangular faces, where always five triangles sort of group around an axis with five-fold symmetry).

Interestingly, instead of some **tan** α the number $N = [1 + (5)^{1/2}]$ appears - which is the "magic number of the **golden ratio**". This may or may not mean something special.

Now you define some neighborhood around your three-dimensional space and start projecting - you will get the exact arrangement of atoms in a real three-dimensional quasicrystal.

Don't worry if you can not imagine all this - nobody can.

Only worry if you can't see that there is a sophisticated, but nevertheless rather clear-cut mathematical procedure of how to construct a three-dimensional point sequence by all this hypercube projection stuff.

If you did not worry so far, you should now, pondering the question: *What does it mean?*

Again, who knows for sure? But we do know that there is some meaning. Let's just look at *one* example.

In three-dimensional quasicrystals we find some entities that look and behave exactly like *dislocations* (a one-dimensional defect in three-dimensional *lattices*). These whatever-they-are entities come into being after some deformation like *real* dislocations, they move through the quasicrystal like *real* dislocation, they look like *real* dislocations in the electron microscope - but they simply cannot be *real* dislocations because *real* dislocations can *only* exist in *periodic* lattices.

Turns out they are dislocations in the *six-dimensional periodic lattice* - no problem to define dislocations there. What we see is sort of what is left in the three-dimensional space where atoms live (not to mention you and me).

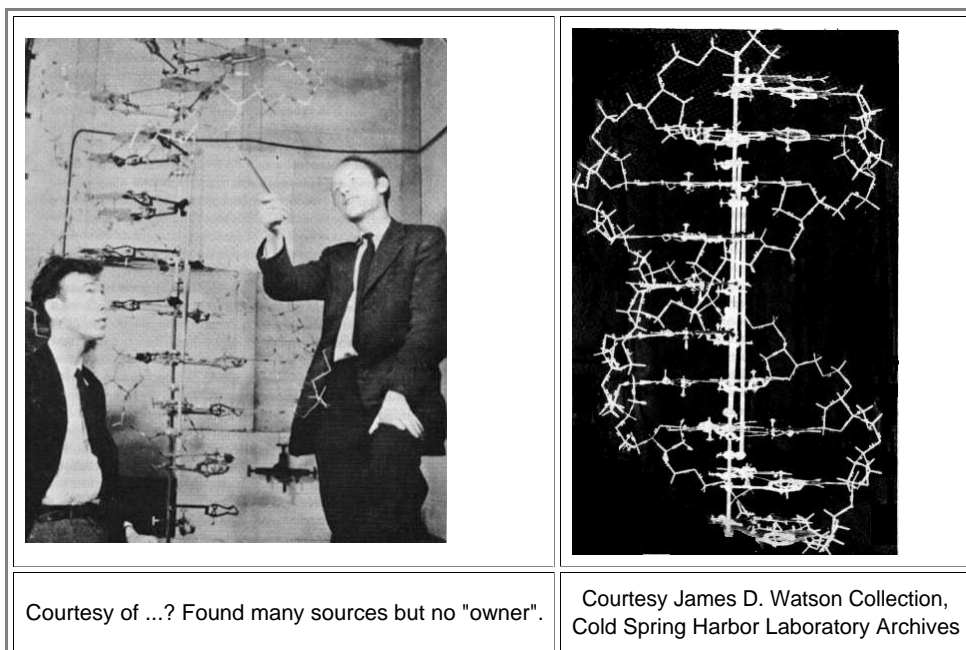
And while *real* dislocations are always characterized by their *Burgers vector* - just a regular vector with three components - the quasicrystal sort-of-dislocations need a vector with *six* components for their characterization.

- Mercifully enough, it turns out that the particulars of the projection scheme always allow to decompose the *one* six-dimensional Burgers vector into *two* three dimensional ones. These two regular vectors have a precise meaning as to what this dislocation-like thing does to the quasicrystal when it moves through it.
- ▮ All in all - quasicrystals, quite unexpectedly, link materials science with rather involved and rather unexpected math. It will be exciting to witness what will come from all this during the next **10** or **20** years.

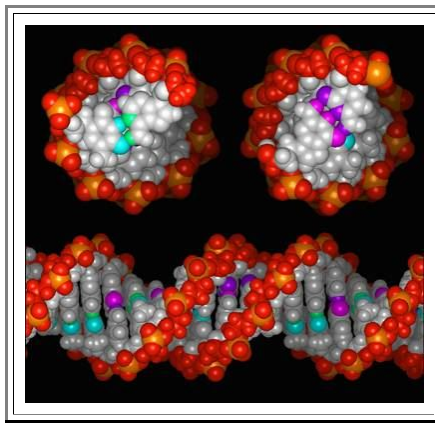
Doppelhelix

Advanced

- Der erste, der darauf hinwies, dass es für den "**genetischen Code**" irgendeinen Speicher geben muß, und dass man dafür keine geheimnisvolle außerphysikalische "Lebenskraft" braucht, sondern die Atom- und Kristallphysik dazu durchaus ausreichen könnten, war der uns wohlbekannte Erwin **Schrödinger**.
 - Er hat **1943** ein Buch mit dem Titel "*Was ist Leben?*" veröffentlicht, in dem er eine Art "aperiodischen" Kristall als Speicher vorschlägt. Wie es sich herausstellte, hatte er auch hier recht.
 - Aber erst Anfang der **50er Jahre** des **20. Jahrhunderts** war dann einigen Spitzenforschern klar (u.a. auch Linus **Pauling**, dem damaligen Topstar der Chemie), dass die **DNS** (Desoxyribonucleinsäure) oder englisch **DNA** (Deoxyribonucleic acid), der Hauptschubstanz im Zellkern aller Organismen, irgendwie den "genetischen Code" enthält oder speichert.
- Klar war auch die grundsätzliche chemische Zusammensetzung, und dass die Struktur "irgendwie" spiralisch sein mußte.
 - Die letztgenannte Information kam von Röntgenstrukturuntersuchungen. Hier muß die unglückliche Rosalind **Franklin** genannt werden; die ganz wesentlich zur "Entdeckung" der Doppelhelix beitrug, aber aus vielerlei Gründen im Schatten der Nobelpreisträger **Watson**, **Crick** und **Wilkins** blieb.
- Ein Studierender der Materialwissenschaft, wie auch sonst jeder auch nur oberflächlich gebildete Mensch, kennt natürlich die Geschichte der Entschlüsselung der **DNA**, so dass sie hier nicht wiederholt werden braucht.
 - Immer noch lesenswert ist übrigens das (damals) absolut skandalöse Buch "Die Doppelhelix" ("The Double Helix") von James D. Watson, in dem er die Geschichte der Entdeckung aus seiner Sicht beschreibt.
 - Und dort kann man auch lesen, was er im wesentlichen getan hat:
- Er hat aus Draht, Blech usw. maßstäblich genaue Modelle der wesentlichen Komponenten gebastelt, und dann damit "herumgespielt".
 - Die nachfolgenden Bilder zeigen Modell und Erfinder (links James Watson; damals **25 Jahre** jung).



- In **1953** fand er eine Anordnung seiner Bauklötzchen, die so gut und einleuchtend war, dass sie einfach stimmen **mußte**. Die "Doppelhelix", ein eindimensionaler "aperiodischer" Kristall, war entdeckt.
 - Aperiodisch, weil zwar in absolut periodischen Abständen entlang des Phosphatzucker -"Rückgrats" eine Base sitzt, es kann aber eine beliebige der vier möglichen sein.
 - Hier ein mehr realistisches Modell:



■ Hatte man erst mal ein quantitatives Modell, ließ sich auch damals verhältnismäßig leicht (von Hand) berechnen, ob die Röntgenmessungen dazu passen. Andersherum ging das leider gar nicht, d.h. man konnte aus noch so guten Messungen kein eindeutiges Modell *berechnen*.

- Man kann das auch heute nicht wirklich. Man kann nur mit der Rechenleistungen moderner Computer sich sehr viel schneller der Realität nähern
- Und damit zur Moral der Geschichte: Auch bei der heutigen Strukturforschung ist es wichtig, sich Anordnungen "vorstellen" zu können, und nicht nur rein formal vorzugehen.

SiC Polytypen

Wir machen uns das Leben einfach und benutzen einen [Modul](#) von einem anderen Hyperskript, der auch gleich die spezielle **Nomenklatur** erklärt.

Mehr über **SiC** im allgemeinen findet sich in [diesem Link](#)

Advanced

Edelsteine

Was sind Edelsteine?

Advanced

Edelsteine nennen wir einige der in der Natur zu findende Kristalle, in der Regel Einkristalle. Aber nicht jeder Einkristall, der uns in der Natur begegnet, ist ein Edelstein. Wir verlangen zusätzlich noch:

- **Seltenheit**. Ist etwas nicht selten, sondern "gewöhnlich", ist es automatisch nicht edel. Die relativ häufig zu findenden Feldspat-, Flußspat- oder Pyritkristalle, obwohl gut aussehend, sind deswegen **keine** Edelsteine.
- **Perfektion**. Einkristallinität genügt nicht - "**Lupenreinheit**" ist wichtig. Dabei bezieht sich die "Reinheit" nicht auf den Gehalt an Fremdatomen, sondern auf **sichtbare** Kristalldefekte, die zum Beispiel aus Ausscheidungen von Verunreinigungen, Einschlüssen einer zweiten Phase, aber auch reinen Defekten des Kristallgitters wie Stapelfehler oder Kleinwinkelkorngrenzen bestehen können.
- **Farbe**. Rubine sind **rot**, Saphire sind **blau**, Citrine **gelb** und Amethyste **violett**. In jedem dieser (und vieler anderen) Fälle kommt die Farbe von einer Verunreinigung mit einem bestimmten Fremdatom.
- **Härte**. Irgendwie sind harte Mineralien "edler" als nicht so harte. Warum, weiß nur der Psychologe.
- **Größe** (gemessen in Karat, einer Gewichtseinheit). Ein **100** karätiger Diamant ist sehr viel mehr wert als **100** Einkaräter.
- Letztlich spielt noch der **Schliff** eine Rolle; die heute übliche Formgebung als Polyeder mit vielen Facetten. Früher (bis zum späten **16.** Jahrhundert) war im übrigen nur der "**Cabochon**" Schliff gebräuchlich (zu besichtigen in den Museen aller Länder und Zeiten), eine Art gestauchte Halbkugel. Den Schliff "erfunden" hat im übrigen Kardinal Jules **Mazarin** (**1602 - 1661**), denn damals fanden die Männer nichts dabei, sich mit Klunkern vollzuhängen.

Man hat früher auch noch unterteilt in die **eigentlichen** Edelsteine (Diamant, Rubin, Saphir, Smaragd) und die **Halbedelsteine** - den Rest.

- Heute spricht man demokratisch von **Schmucksteinen**, und zählt dazu auch Materialien, die nichtkristallin oder noch nicht mal richtige "Steine" sind (z.B. **Opale**, **Perlen**, **Bernstein**, **Korallen**).
- Hier teilen wir die Welt der Schmucksteine mal in die Kristalle und die Nicht-Kristalle. Bei den Kristallen finden wir die meisten Mitglieder in einigen wenigen Grundstrukturen, die wir uns jetzt kurz anschauen

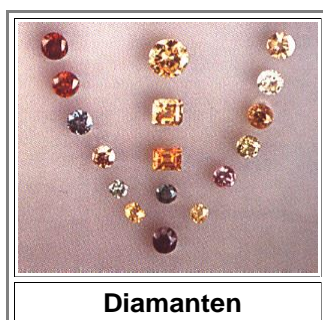
Einkristalline Schmucksteine

Diamant

- Diamanten sind in einer Klasse für sich. Sie bestehen aus Kohlenstoff (**C**), der in dem bei Normaldruck und Temperatur eigentlich instabilem Diamantgitter kristallisiert ist. Die stabile Form des Kohlenstoffs ist das hexagonale Graphit.
- Der Diamant ist der einzige Vertreter seiner Gitterart. Farbe kommt in das Gitter durch Verunreinigungen mit anderen Atomen; siehe unten.

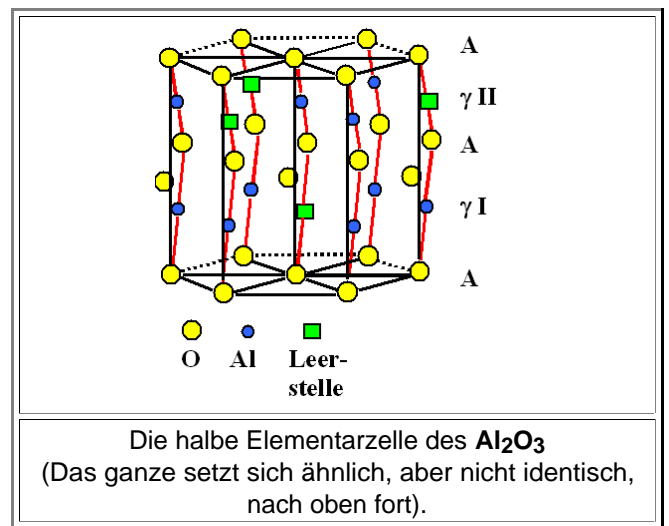
Korund

- Ein indisches Wort für das schlichte trigonale Mineral **Al₂O₃**, d.h. Aluminiumoxid, gern benutzt als Schleifmittel und auf Schmirgelpapier, da ziemlich hart (Härte nach Mohs = **9**). Dann aber meist mit **Fe** verunreinigt und trüb.
- Anderweitig saubere Einkristalle mit etwas **Cr** oder **Ti** oder Magnetit (**Fe₃O₄**) nennt man **Rubin** (rot) bzw. **Saphir** (blau).





Saphir



- Insbesondere "gute" Rubine sind genauso teuer wie Diamanten; Saphire gibt's etwas billiger. Es ist heute kein Problem, diese Edelsteine künstlich herzustellen; sie haben (und insbesondere hatten) vielfältigen technischen Einsatz (Rubine als Lager in Uhren und für Laser, Saphire als Tonabnehmer in frühen Plattenspielern). Künstliche "Schmuckrubine" sind aber nicht akzeptabel.

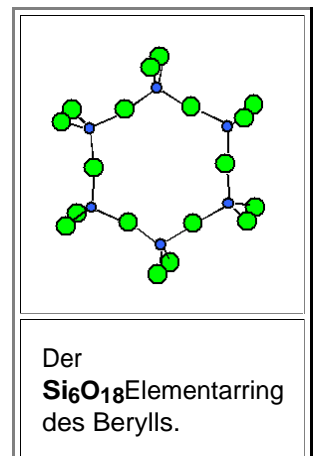
Beryll

- Ein griechisches Wort für das vielfältige Mineral $\text{Be}_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$; mit hexagonalem Gitter und offenbar recht komplizierter Basis. An sich recht häufig und in reiner Form völlig durchsichtig. Die "Brille", eine der Schlüsselerfindungen der Menschheit, geht auf geschliffenen farblosen Beryll (sog. *Goshenit*) zurück - im Wort "Brille" klingt der Beryll noch nach.

- Die Elementareinheit bildet eine Si_6O_{18} Ringstruktur wie nebenstehend gezeigt. Eine Schichtung dieser Ringe ergibt die hexagonale Symmetrie. Der freie Raum in den Säulen wird mit den Metallatomen "gefüllt".

- Als Einkristall mit den richtigen Verunreinigungen ist Beryll die Basis für eine ganze Reihe von Schmucksteinen:

- **Smaragd** (engl. Emerald). Grün durch etwas **Cr** oder genauer CrO_3
- **Aquamarin**, blassblau, blau bis grünlich.
- **Morganit**, rosenrot durch etwas **Mn**
- **Goldberyll**, gelb, als Heliodor grünlich gelb.



Smaragd



Aquamarin

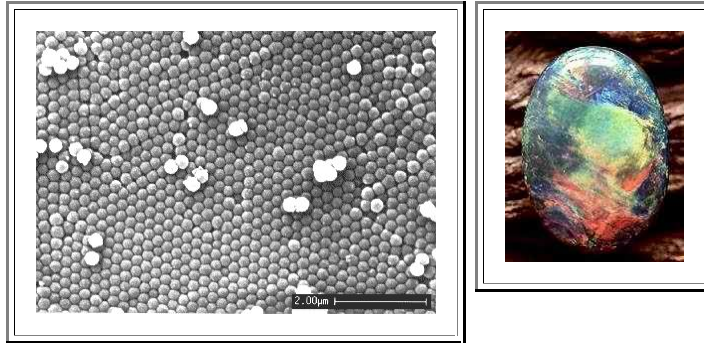


Morganit

Quarz

- SiO_2 in kristalliner oder amorpher Form ist nicht nur von extremer technischer Wichtigkeit (ohne SiO_2 keine Mikroelektronik!), sondern auch die Basis einer langen Reihe von Schmucksteinen.
- **Bergkristall**, der reine trigonale SiO_2 Kristall.

- **Amethyst** (violett durch), **Rauchquarz** (hell- bis dunkelbraun, durch...), **Rosenquarz** (rosa durch ...) und **Citrin** (gelb durch..) sind gefärbte Bergkristalle.
- In feinkristalliner oder amorpher Form gibt es noch **Chalzedon**, **Jaspis**, **Achat**, **Sarder**, **Onyx**, **Heliotrop**, **Chrysopras**, **Karneol** und wahrscheinlich noch mehr.
- Ein besonders spannender **SiO₂** basierter Schmuckstein ist der **Opal**
 - Er gilt als amorphe Form des **SiO₂**. Das ist aber nicht ganz richtig. Denn er besteht aus amorphen **SiO₂** Kügelchen mit Durchmessern im **200 nm** Bereich, die sich anschließend zu einem **fcc** Kristall ordnen.
 - Das hat außerordentlich interessante Auswirkungen auf die Wechselwirkung mit Licht; ein ganzes Forschungsgebiet hat sich seit etwa **1990** daraus entwickelt, man spricht von **photonischen Kristallen**. Die Bilder unten zeigen den kristallinen Aufbau der **SiO₂** Kügelchen und das daraus resultierende Farbenspiel eines Opals.



- Es gibt natürlich noch mehr (ein)kristalline Schmucksteine mit zum Teil sehr komplexer Struktur: Hier sind noch ein paar der interessanteren:

■ Turmalin.

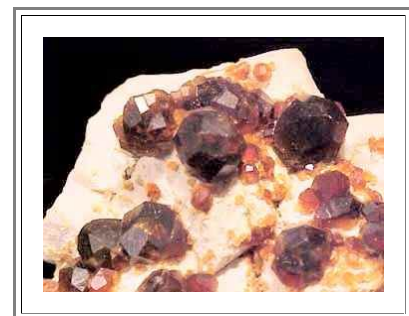
- Mit der chemischen Formel **(NaLiCa)(Fe₁₁ MgMnAl)₃Al₆ (OH)₄(BO₃)Si₆O₁₈**.
- Es wundert kaum noch, daß Turmaline in allen Farben vorkommen, manchmal in einem Kristall wechselnd.

■ Rhodonit.

- Mit der chemischen Zusammensetzung **Mn(SiO₃)** oder besser **CaMn₄ (Si₅O₁₅)**. Rhodonit besitzt eine licht-fleischrote bis dunkelrote Farbe.

■ Granate (engl "Garnets"), mit der "[Spinell Struktur](#)".

- Allgemeine Zusammensetzung: **M¹₃ M²₂(SiO₄)₃** (**M¹=Mg, FeII, Mn, Ca; M²=Al, FeIII, Cr**). Viele Farbvarianten, aber **nie** blau. Einige Varianten sind:
 - **Pyrop** (**Mg₃Al₂(SiO₄)₃**), dunkelrot, böhmischer Granat,
 - **Almandin** (**Fe₃Al₂(SiO₄)₃**), rot bis braunrot, gemeiner Granat
 - **Spessartin** (**Mn₃Al₂(SiO₄)₃**), orangegelb bis rot,
 - **Grossular** (**Ca₃Al₂(SiO₄)₃**), blassgrün; Abart roter bis brauner **Hessonit**,
 - **Uwarowit** (**Ca₃Cr₂(SiO₄)₃**), smaragdgrün,
 - **Andradit** (**Ca₃Fe₂(SiO₄)₃**), gelbgrünlich; mit Abarten wie **Schorlomit** und **Melanit**, beide schwarz, und dem durchsichtig grünen **Demantoid** und **Topazolith** mit Schmucksteinqualität



- Aber jetzt sind wir mitten in der **Mineralogie** und hören auf mit dem einkristallinen Schmucksteinen.

- Es bleiben bei den Kristallen noch die **polykristallinen** mineralischen Schmucksteine.

Da wäre der "türkisfarbene" **Türkis** ($\text{CuAl}_6[(\text{OH})_8](\text{PO}_4)_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$; der tiefblaue **Lapislazuli** ($(\text{Na}, \text{Ca})_8[(\text{SO}_4, \text{S}, \text{Cl})_2](\text{AlSiO}_4)_6$) und die grünliche **Jade**, eine zusammenfassende Bezeichnung für die fein verfilzten, dichten Aggregate der zu den Pyroxenen zählenden Minerale **Jadeit** ($\text{NaAl}(\text{Si}_2\text{O}_6)$), **Chloromelanit** (dem Jadeit ähnlich, dunkelgrün) und **Nephrit**; alles Schmucksteine von grünlicher Farbe.



Jetzt hören wir auf mit den Kristallen. Bleiben noch die amorphen Schmucksteine.

Nichtkristalline und "organische" Schmuck"steine"

Glas in allen Farben war natürlich immer schon beliebt (die alten Ägypter hatten Glasperlen schon **3000** vor unserer Zeit), insbesondere auch um richtige Edelsteine zu **fälschen**.

Der **Obsidian**, ein natürliches (vulkanisches) Glas war weniger als Schmuckstein und mehr für Werkzeuge im Gebrauch - wie der nahe Verwandte **Feuerstein**.

Besonders prominent unter den biologisch entstandenen Schmucksteinen ist der **Bernstein**; (unter Sauerstoffausschluß unter Wasser) versteinertes Baumharz, bis zu **400 Mio** Jahre alt, gelegentlich noch mit gut konservierten Insekten (siehe rechts).

Bernstein besteht aus **73,8 %** Kohlenstoff, **9,5 %** Wasserstoff, **10,5 %** Sauerstoff und **0,1 %** Schwefel; es ist ein **Polymer**.

Der Bernstein wurde früh (schon in der Steinzeit) und weit gehandelt, ist heute aber eher wenig wert.

Einschlüsse von Insekten machen ihn nicht nur sehr viel wertvoller, sondern geben Anlaß zu extrem erfolgreichen, wenn auch nicht sehr realistischen Filmen.



Perfekte **Perlen** waren früher genauso teuer wie Diamanten.

Erst seitdem Zuchtperlen den Markt erobert haben (von Kunstperlen ganz zu schweigen) sind Perlenketten für jederfrau erschwinglich.

Perlen sind spezielle Ausscheidungen von Mollusken (nicht nur Austern können das), mit denen sie einen Fremdkörper umhüllen. Der "Perlmutter" Glanz kommt übrigens von einer Struktur, die ebenfalls eine Art **photonischen Kristall** bildet wie beim **Opal**.



Gelegentlich recht beliebt war auch "**Jet**" (bei den Römern und dann wieder in viktorianischen Zeiten). "Jet" ist englisch; auf deutsch heißt der Schmuckstein "**Pechkohle**" oder - da das nicht so edel klingt - **Gagat**.

- Es ist versteinertes Holz bzw. Kohle. "*Jet black*" ist der englische Ausdruck für kohl- oder rabenschwarz; damit ist die Farbe erklärt.
- Der Begriff "versteinerte Kohle" ist natürlich Blödsinn; aber so wird das durchgehend beschrieben. Ein schönes Beispiel dafür, dass ein großer Teil der Menschheit nach wie vor glaubt, dass man eine Sache verstanden hat, wenn man sie irgendwie benennt
- "Denn eben wo Begriffe fehlen, das stellt ein Wort zu rechten Zeit sich ein"
Wie wahr!



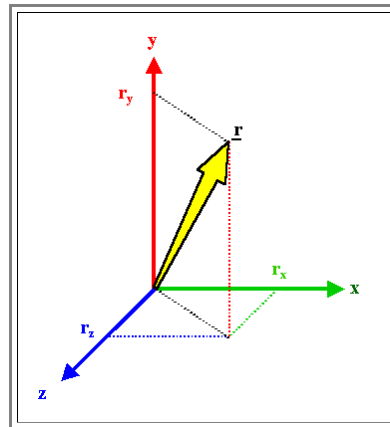
Vektorrechnung

- In diesem Modul werden nur einige grundsätzliche Bemerkungen gemacht und die wichtigsten Formeln der **Vektorrechnung** zusammengestellt.
- Wer nicht bereits halbwegs mit der Vektorrechnung vertraut ist, tut gut daran, ganz schnell entsprechende Mathe- oder Physikbücher zu konsultieren.
- Wir symbolisieren Vektoren in diesem Modul immer durch Unterstriche
math display="block">\vec{F}_1 = (x_1, y_1, z_1)
$$\vec{F}_2 = (x_2, y_2, z_2)$$

Basics

Was sind Vektoren?

- Es ist gar nicht so einfach, außerhalb der "reinen" Mathematik zu definieren was **genau** ein Vektor ist. Es ist aber auch nicht so furchtbar wichtig, da es für den "Normalgebrauch" fast immer klar genug ist.
- Für unsere Zwecke ist ein Vektor ein **physikalisches Objekt**, d.h. eine real existierende Größe wie die Geschwindigkeit, die elektrische Feldstärke oder eine Kraft, die **immer** beschrieben werden muß durch einen Betrag **und** eine Richtung.
 - Ein Vektor kann damit durch einen Pfeil repräsentiert werden, dessen Länge dem Betrag entspricht und dessen Richtung eindeutig durch die Pfeilspitze gegeben ist.
 - In einem willkürlich gewählten Koordinatensystem (zur Einfachheit mit Ursprung am Pfeilende) kann jeder Vektor dann durch seine drei **Komponenten** (den Projektionen auf die Achsen) eindeutig beschrieben werden.



- Damit erschließen sich sofort die wesentlichsten Eigenschaften, die zwar in der folgenden Auzählung etwas redundant sind, aber damit auch mehr Klarheit schaffen.
- 1. Zwei Vektoren sind **gleich**, falls sie in Betrag und Richtung übereinstimmen.
 - Eine einfache Aussage, aber mit "Tiefgang". Da eine Parallelverschiebung im Raum den "Pfeil" **nicht** ändert, sind zwei Vektoren **auch dann noch gleich**, wenn sie irgendwo im Koordinatensystem zu finden sind. Das hat eine sofortige Konsequenz:
 - Durch Pfeile repräsentierbare physikalische Größen, bei denen eine Verschiebung des Pfeils eine **unterschiedliche** Situation ergibt, sind dann **keine** Vektoren im strengen Sinn!
 - Ein Beispiel dazu: Eine Kraft \vec{F} , die auf einen **Massenpunkt** P wirkt, ist ein Vektor - denn es ist egal, wo genau im Raum sie auf P wirkt, es geschieht immer dasselbe.
 - Eine Kraft \vec{F} , die auf einen **Hebelarm** wirkt, ist **kein** Vektor in voller Strenge, denn was geschieht ist vom **Drehmoment** = Kraft mal Hebelarm abhängig; eine Verschiebung von \vec{F} produziert eine neue Situation.
- 2. Vektoren werden **addiert** indem man (in cartesischen **KO**-Systemen) ihre Komponenten addiert (dabei beginnen die Vektoren immer im **0**-Punkt des **KO**-Systems, wir dürfen sie ja beliebig verschieben).
 - Mit

$$\vec{F}_1 = (x_1, y_1, z_1)$$

$$\vec{F}_2 = (x_2, y_2, z_2)$$

- folgt

$$\underline{F}_3 = \underline{F}_1 + \underline{F}_2$$

$$= (x_1 + x_2, y_1 + y_2, z_1 + z_2)$$

- Umgesetzt auf physikalische Größen begrenzt diese Definition wiederum die Vielfalt der möglichen Vektoren. In Worten sagt das Additionsprinzip:

Kommt man von einem gegebenen physikalische Zustand zu einem anderen, indem man erst entlang des Vektors \underline{r}_1 läuft, und anschließend entlang des Vektors \underline{r}_2 , so ist der dann erreichte Zustand identisch zu dem Zustand den man erreicht wenn man gleich vom Ausgangszustand entlang dem Vektor $\underline{r}_3 = \underline{r}_1 + \underline{r}_2$ läuft.

- Das ist am besten zu verstehen, indem man sich anschaut für welche "Pfeile" dies gilt und für welche es *nicht* gilt.
- Die Aussage gilt sicherlich für Ortsvektoren, aber auch z.B. für Geschwindigkeiten, Beschleunigungen oder Feldstärken.
- Sie gilt aber beispielsweise *nicht* für Pfeile die Drehungen symbolisieren indem man den "Drehpfeil" in die Drehachse legt und sein Länge proportional zum Drehwinkel macht. Zum Beispiel produziert eine Drehung um 90° um die x -Achse, gefolgt von einer Drehung um 90° um die y -Achse, einen ganz anderen Zustand als *eine* Drehung um die "Summenachse" (mal in Gedanken für ein schleuderndes Auto probieren!).

3. Vektoren sind *invariant* gegenüber einer Koordinatentransformation.

- Das muß so sein - schließlich kann die Beschreibung einer physikalische Größe nicht davon abhängen, wie wir ein Koordinatensystem wählen. Ist der Pfeil einmal definiert, wird er immer gleich bleiben, egal, wie wir das **KO**-System aufspannen.
- Das gilt aber nur für den Pfeil "an sich" - den *Vektor* - nicht für die *Zahlenwerte* seiner Komponenten. Diese sind notgedrungen immer auf das **KO**-System bezogen.

Damit sind die **Transformationseigenschaften** der Komponenten eines Vektors festgelegt. Hat der Vektor im x - y - z **KO**-System die Komponenten (x_1, y_1, z_1) , müssen sich die Zahlenwerte (x'_1, y'_1, z'_1) in irgendeinem neuen System x' - y' - z' in eindeutiger und definierter Weise aus der Transformationsvorschrift (= Transformationsmatrix) errechnen lassen, die das neue System produziert.

- Ein wichtiger Punkt am Rande: Die Aussage, daß ein Vektor beim Wechsel des Koordinatensystems unverändert bleibt, gilt zwar *auch* bei einem Wechsel von cartesischen zu nicht-cartesischen Systemen, beispielsweise beim Übergang von x - y - z Koordinaten zu Polarkoordinaten - *aber das gilt nicht immer für die Rechenvorschriften*. Zwei Vektoren in Polarkoordinaten werden *nicht* addiert, indem man ihre Komponenten addiert - mal ausprobieren!

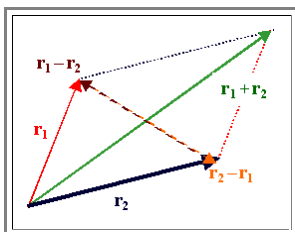
Das reicht eigentlich schon. Denn daraus folgt die wesentliche Nutzung: *Vektorgleichungen sind unabhängig von Koordinatensystem* - und damit läßt sich das Leben erheblich vereinfachen!

- $\underline{F} = \underline{m} \cdot \underline{a}$ gilt in jedem System: cartesisch, polar, krumm - es ist egal.

Rechnen mit Vektoren

Im folgenden werden nur noch die wichtigsten Formeln als Gedächtnisstütze gegeben - eine gewisse Vertrautheit mit Vektorrechnung wird vorausgesetzt.

Die **Addition und Subtraktion von Vektoren** ist klar - graphisch erhalten wir die Diagonalen im Vektorparallelogramm.



Numerisch addieren oder subtrahieren wir, wie *oben* schon ausgeführt, indem wir die Komponenten addieren oder subtrahieren - aber bitte *nur in cartesianischen KO-Systemen*!

- Addition und Subtraktion sind kommutativ und assoziativ:

$$\underline{x} + \underline{y} = \underline{y} + \underline{x}$$

$$(\underline{x} + \underline{y}) + \underline{z} = \underline{x} + (\underline{y} + \underline{z})$$

$$= \underline{y} + (\underline{x} + \underline{z})$$

- Daß man in anderen **KO**-Systemen aufpassen muß wird sofort klar, wenn wir z.B. den Vektor $\underline{u} = (r, \phi)$, gegeben durch die Komponenten r und ϕ in Polarkoordinaten, zu sich selbst addieren, d.h. schlicht seine Länge verdoppeln. Die Addition der Komponenten gibt offenbar etwas falsches!

Skalarprodukt und Vektorprodukt

- Nach der Addition und Subtraktion, ist die Verknüpfung der Multiplikation zu behandeln. Dies kann man bei Vektoren auf **zwei** sinnvolle Arten tun: **Skalarprodukt** und **Vektorprodukt**.
- Das **Skalarprodukt** verknüpft zwei Vektoren zu einem Skalar. Das Skalarprodukt S zweier Vektoren \underline{A} und \underline{B} ist wie folgt definiert

$$S = \underline{A} \cdot \underline{B} = |\underline{A}| \cdot |\underline{B}| \cdot \cos(\underline{A}, \underline{B}) = \underline{A} \cdot \underline{B} \cdot \cos(\underline{A}, \underline{B})$$

- Mit $(\underline{A}, \underline{B})$ = Winkel zwischen \underline{A} und \underline{B}
- Skalarprodukte sind kommutativ und distributiv:

$$\underline{A} \cdot \underline{B} = \underline{B} \cdot \underline{A}$$

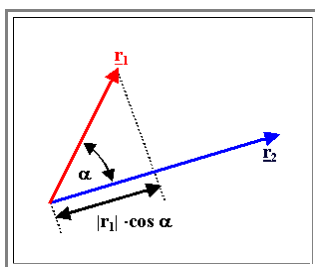
$$\underline{A} \cdot (\underline{B} + \underline{C} + \underline{D} + \dots) = \underline{A} \cdot \underline{B} + \underline{A} \cdot \underline{C} + \underline{A} \cdot \underline{D} + \dots$$

- In cartesischen **KO**-Systemen erhält man das Skalarprodukt durch die Summation der Produkte gleichartiger Komponenten, d.h.

$$S = \underline{A} \cdot \underline{B} = A_x \cdot B_x + A_y \cdot B_y + A_z \cdot B_z$$

- Man erkennt ansatzweise die Eleganz der Vektorrechnung: Das Skalarprodukt zweier Vektoren, die senkrecht aufeinanderstehen, ist immer = **0** - egal welchen numerischen Wert die Komponenten in irgendeinem Koordinatensystem haben.

- Das Skalarprodukt kann man leicht interpretieren



- Da $|\underline{A}| \cdot \cos(\underline{A}, \underline{B})$ gleich der Projektion des Vektors \underline{A} auf die Richtung von \underline{B} ist (und umgekehrt), ist das skalare Produkt identisch zu der Länge des einen Vektors multipliziert mit der **projizierten** Länge des anderen.
- Das Skalarprodukt hat eine herausragende Eigenschaft: Im Vergleich zu "normalen" Produkten - d.h. dem Produkt zweier Skalare - kann es auch dann = **0** sein, wenn beide "Faktoren" ungleich Null sind.

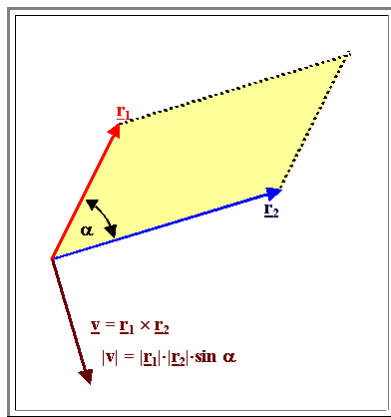
- Das Skalarprodukt kann man auch nutzen, um den Betrag eines Vektors einfach zu berechnen. Dazu bilden wir einfach das Skalarprodukt des Vektors \underline{A} mit sich selbst und erhalten

$$\underline{A} \cdot \underline{A} = A_x \cdot a_x + A_y \cdot B_a + A_z \cdot a_z = A^2$$

oder

$$A = |\underline{A}| = (A^2)^{1/2}$$

- Das **Vektorprodukt** verknüpft zwei Vektoren zu einem neuen Vektor. Das Vektorprodukt \underline{V} zweier Vektoren \underline{A} und \underline{B} ist wie folgt definiert:



- 1 \underline{V} steht senkrecht auf der von \underline{A} und \underline{B} aufgespannten Ebene.
- 2. Für den Betrag gilt

$$|\underline{V}| = V = S = |\underline{A}| \cdot |\underline{B}| \cdot \sin(\underline{A}, \underline{B})$$

$$= A \cdot B \cdot \sin(\underline{A}, \underline{B})$$

- Mit $(\underline{A}, \underline{B})$ = Winkel zwischen \underline{A} und \underline{B}
- 3. Die Richtung von \underline{V} wird durch eine "rechte Handregel" gegeben. Im Klartext: Daumen und Zeigefinger der rechten Hand bilden einen rechten Winkel. Der Zeigefinger repräsentiert den Vektor \underline{A} ; er wird in Richtung \underline{B} gedreht so daß die Handfläche zeigt auf \underline{B} . Der Daumen zeigt dann in Richtung von \underline{V} . Anders ausgedrückt: In Richtung von \underline{V} blickend, muß die im Uhrzeigersinn erfolgende Drehung von \underline{A} auf \underline{B} den kleinstmöglichen Winkel überdecken.

- Die wesentlichen Eigenschaften sind

$$\underline{V} = \underline{A} \times \underline{B}$$

$$= -\underline{B} \times \underline{A}$$

- d.h. das Vektorprodukt ist *nicht* mehr *kommutativ*. Es ist aber immer noch *distributiv*, d.h.

$$\underline{A} \times (\underline{B} + \underline{C} + \underline{D} + \dots) = \underline{A} \times \underline{B} + \underline{A} \times \underline{C} + \underline{A} \times \underline{D} + \dots$$

- Damit gilt auch

$$a \cdot \underline{A} \times \underline{B} = a \cdot (\underline{A} \times \underline{B}) = \underline{A} \times a \cdot \underline{B}$$

- Die Komponenten von \underline{V} errechnen sich in *cartesischen KO-Systemen* wie folgt

$$V_x = A_y \cdot B_z - A_z \cdot B_y$$

$$V_y = A_z \cdot B_x - A_x \cdot B_z$$

$$V_z = A_x \cdot B_y - A_y \cdot B_x$$

- Das kann man auch als *Determinante* schreiben:

$$\underline{V} = \underline{A} \times \underline{B} = \begin{vmatrix} \underline{x} & \underline{y} & \underline{z} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}$$

- Mit \underline{x} , \underline{y} , \underline{z} = Einheitsvektoren in den Achsenrichtungen.

Das Vektorprodukt hat einige wichtige direkt interpretierbare Eigenschaften:

- Falls $\underline{A} \times \underline{B} = \underline{0}$, müssen die beiden Vektoren parallel sein. Insbesondere ist $\underline{A} \times \underline{A} = \underline{0}$.
- Die Fläche des von den Vektoren \underline{A} und \underline{B} aufgespannten Parallelogramms ist gleich dem Betrag von $\underline{A} \times \underline{B}$.

Mehrfachprodukte

Produkt eines Vektors mit dem Skalarprodukt zweier anderer Vektoren

- Multiplizieren wir den Vektor \underline{A} mit dem Skalarprodukt $\underline{B} \cdot \underline{C}$ zweier anderer Vektoren, ändern wir einfach die Länge von \underline{A} .
- Es gilt

$$\underline{A}' = \underline{A} \cdot (\underline{B} \cdot \underline{C})$$

- Aufpassen muß man nur, weil wir *zwei* verschiedene Multiplikationen haben, insbesondere ist

$$\underline{A} \cdot (\underline{B} \cdot \underline{C}) \neq (\underline{A} \cdot \underline{B}) \cdot \underline{C}$$

Skalarprodukt eines Vektors mit dem Vektorprodukt zweier anderer Vektoren

- Wir erhalten einen Skalar, der auch **Spatprodukt** genannt wird. Der resultierende Skalar ergibt das Volumen des von den drei Vektoren gebildeten Parallelepipeds.

$$V = \underline{A} \cdot (\underline{B} \times \underline{C})$$

- Es gilt

$$\begin{aligned} \underline{A} \cdot (\underline{B} \times \underline{C}) &= + \underline{B} \cdot (\underline{C} \times \underline{A}) \\ &= + \underline{C} \cdot (\underline{A} \times \underline{B}) \\ &= - \underline{A} \cdot (\underline{C} \times \underline{B}) \\ &= - \underline{B} \cdot (\underline{A} \times \underline{C}) \\ &= - \underline{C} \cdot (\underline{B} \times \underline{A}) \end{aligned}$$

- Eine etwas trickreiche Vorzeichensache, die man wiederum viel eleganter in Determinantenform ausdrücken kann:

$$\underline{A} \cdot (\underline{B} \times \underline{C}) = \begin{vmatrix} A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix}$$

Multiple Choice Test zu

3.1.1 Was sind Kristalle? - Allgemeines

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.1.2 Kristall = Gitter + Basis

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.1 Was sind Kristalle?

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.2.1. Richtungen und Ebenen im Gitter

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.3.1 Die wichtigsten Gitter der Elementkristalle

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.3.2 Bravaisgitter und dichteste Kugelpackung

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.3.3 Weitere wichtige Kristalltypen

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

3.3 Wichtige Gitter und Kristalle

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

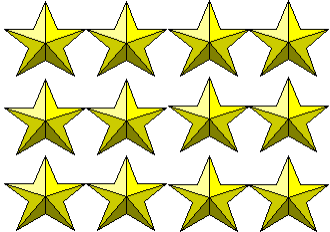
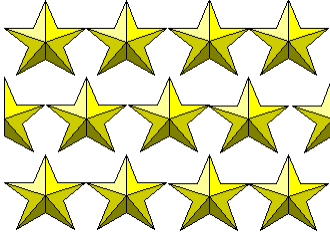
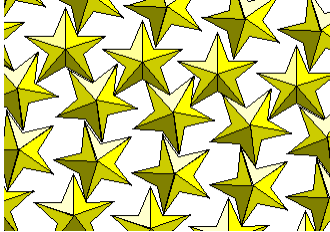
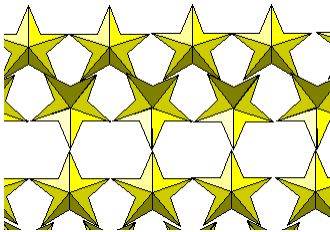
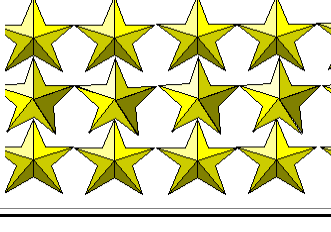
3. Perfekte Kristalle

Start Multiple Choice

Übung 3.1-1:

Identifikation von Gitter und Basis

Finden Sie für die nachfolgenden *Kristalle* das *Gitter* und die *Basis* (Kleine Unterschiede in den Sternen nicht beachten!).

Kristall	=	Gitter	+	Basis
	=		+	
	=		+	
	=		+	
	=		+	
	=		+	

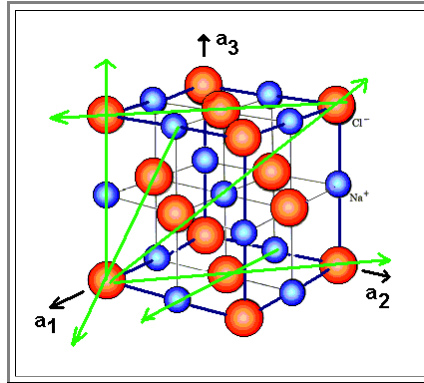


Lösung

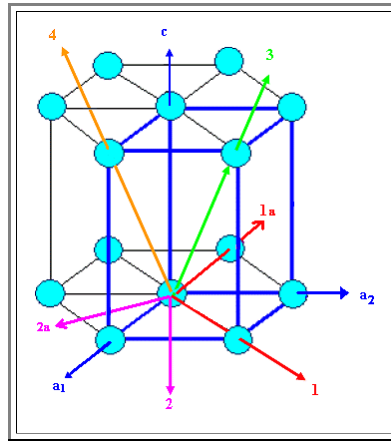
Übung 3.2-1: Richtungen im Gitter

Indiziere alle eingezeichneten Richtungen in den folgenden Gittern:

- Kubisch flächenzentriertes** Bravais Gitter. Hier gezeichnet mit einer Basis; der resultierende Kristall könnte z.B. **NaCl** sein.



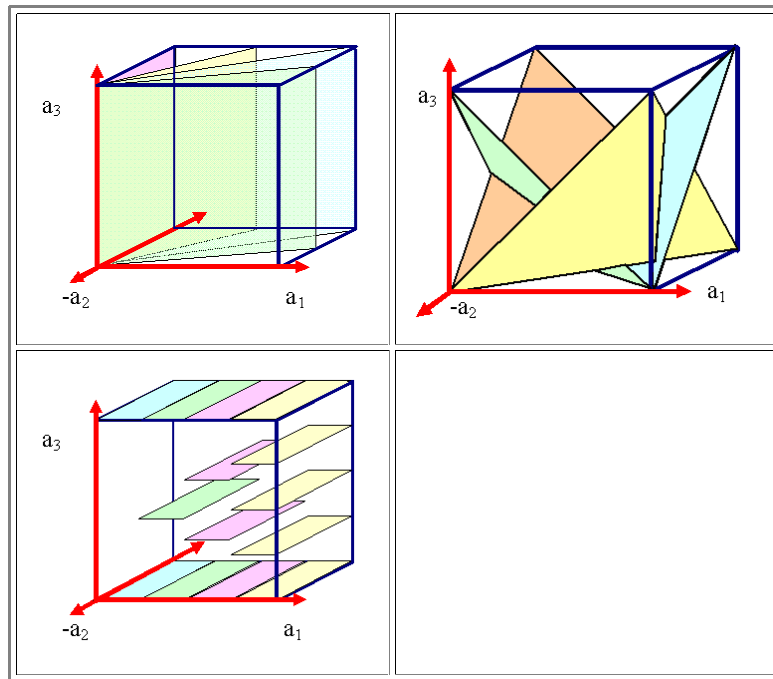
- Hexagonales** Bravais Gitter. Fällt Ihnen etwas auf?



Lösung

Übung 3.2-2: Ebenen in Gittern und Kristallen

Indiziere die markierten Ebenen und Ebenenscharen im gegebenen Koordinatensystem



Lösung

Übung 3.2-3:

Ebenenabstand und Rechnen mit Miller Indizes

Zeige, dass für ein [orthombisches Bravaisgitter](#) die Ebenen mit der Miller Indizierung $\{hkl\}$ folgenden Abstand d_{hkl} haben:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2\}^{1/2}}$$

Die a , b , c sind die Längen der Basisvektoren.

Hinweis: Zeichne eine Ebene mit beliebigen $h, k, l > 1$ in eine orthorhombische Elementarzelle, und überlege, welchen Zahlenwert ausgedrückt in Einheiten von a, b, c die Schnittpunkte mit den Achsen haben, und wo der Ebenenabstand auftaucht.

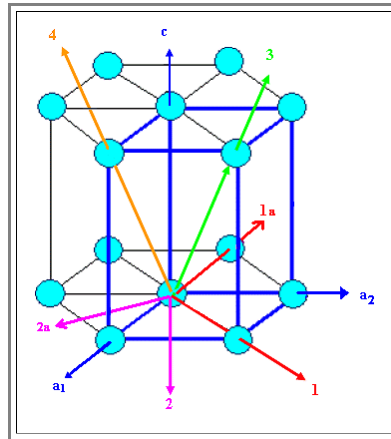
Es ist zielführender, willkürliche (unspezifizierte) h, k, l zu wählen als besonders einfache!



Lösung

Übung 3.2-4: Richtungen im hexagonalen Gitter

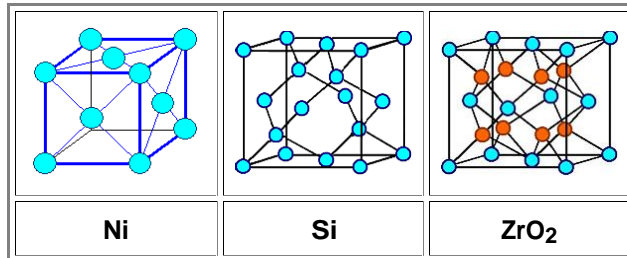
- Wir betrachten nur die Richtungen **1** und **2** des unten gezeigten, aus [Übung 3.2-1](#) schon bekannten Bilds des hexagonalen Bravais Gitters.
- Zeichne alle kristallographisch gleichwertigen Richtungen ein und indiziere sie; diskutiere das Ergebnis.
 - Benutze jetzt die "[Vierer](#)"-Indizierung; diskutiere wiederum das Ergebnis.



Lösung

Übung 3.3-1: Ein bißchen Geometrie zu Gittern

- Wie groß ist die Gitterkonstante **a** des **fcc** und **bcc** Gitters ausgedrückt in Atomradien **r**?
 - Dabei unterstellen wir natürlich, dass die "Kugeln" der Atome sich gerade berühren.
- Wie groß ist das Achsenverhältnis **c/a** für das hexagonale Gitter, falls ein Kristall mit dichtester Kugelpackung (d.h. **PD = 0,74**) erzeugt werden soll?
- Wieviel Atome enthält die Elementarzelle von **Ni**, **Si**, **ZrO₂**? Die Kristalle sind unten gezeigt; die Antwort ist durch Abzählen zu erhalten.
 - Wieviele Atome hat die jeweilige Basis?



- Die Gitterkonstanten von **Ni**, **Pb** und **Si** sind **3,52 Å**, **4.95Å** und **5.43Å**. Wie groß ist die Dichte?
- Vergleiche die Dichte von **Si** in einem **Si** Kristall mit der Dichte des **Si** (und nur des **Si**!) in einem **SiO₂** (= Quarz) Kristall.
 - Was folgt daraus für die Oxidation von **Si**? Bedenke, dass Sauerstoff durch die bereits gebildete **SiO₂** Schicht diffundieren muß und dann durch "Eindringen" in das **Si** Gitter **SiO₂** bildet.



Lösung

Übung 3.3-2:

Die {111} Ebenen in der $\langle 110 \rangle$ Projektion



Zeichne die Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer $\langle 110 \rangle$ Richtung.



Zeichne in diese Projektion die beiden {111} Ebenen ein, die die Projektionsrichtung enthalten.



Betrachte die Stapelfolge auf diesen {111} Ebenen.



Es ist sehr lehrreich, sich mit Gitterprojektionen zu beschäftigen; d.h. die dreidimensionale Anordnung von Gitterpunkten (oder Atomen im Kristall) auf eine zweidimensionale Ebenen zu projizieren.



Besonders wichtig ist die in der Aufgaben gefragte Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer $\langle 110 \rangle$ Richtung; das werden wir öfters mal brauchen.



Lösung

Übung 3.3-3:

Die Basisvektoren beim Stapeln von $\{111\}$ Ebenen

Zeigen Sie, daß folgende Aussagen richtig sind:

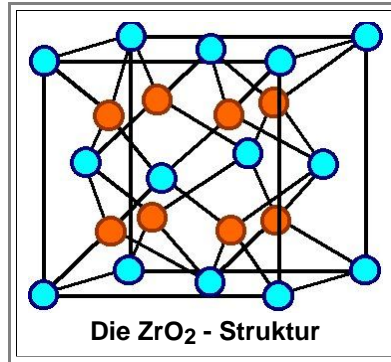
- Der Vektor, der eine Atomlage (z.B. die **B** - Lage) durch eine Verschiebung in der $\{111\}$ Ebenen in die jeweils andere mögliche Ebene überführt (im Beispiel wäre das eine **C** - Ebene), ist von der Form $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$
- Der Vektor der von einer $\{111\}$ Ebene zur darüber- oder darunterliegenden $\{111\}$ Ebene führt, ist von der Form $\mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$



Lösung

Übung 3.3-4: Der Kristallstrukturtyp von ZrO_2 (Kubisches Zirkonoxid)

- Das nachfolgende Bild zeigt den kubischen ZrO_2 Kristall.
- Jedes (rote) Sauerstoffatom sitzt im Zentrum eines durch Zr - Atome gebildeten Tetraeders - so wie die Atome im Diamantgitter auch
 - Es gibt aber doppelt so viele O - Atome wie Zr - Atome - im Gegensatz zum z.B. GaAs .
- Ist das ein Kristall der zur Gruppe der Kristalle mit [ZnS - Struktur](#) gehört? Was ist das Bravaisgitter? Wie sieht die Basis aus? Was macht den Unterschied zum GaAs ?



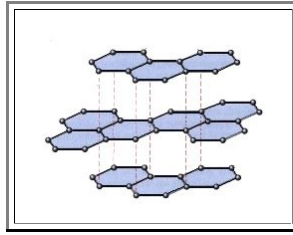
Lösung

Übung 3.3-5:

Hat Graphit eine hcp-Struktur?



Das nachfolgende Bild zeigt die Graphitstruktur



- Die Atome in den (blauen) Ebenen sind kovalent gebunden, zwischen den Ebenen gibt es nur schwache [van-der-Waals Bindungen](#)
- Ist das ein [hcp Kristall](#)? man beachte, daß das Zentralatom in den Sechsecken fehlt - im Vergleich zu der [gezeichneten hcp Struktur](#)!
- Hier die wesentliche Frage: *Was ist die Elementarzelle und die Basis für Graphit?*



Lösung

Lösungen zur Übung 3.1-1


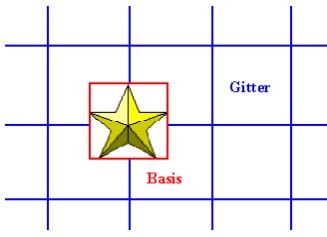
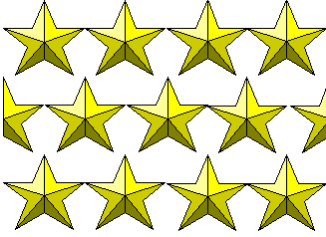
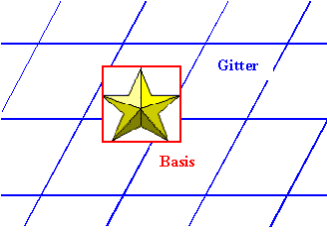

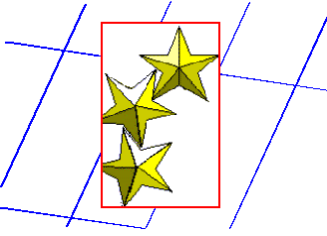
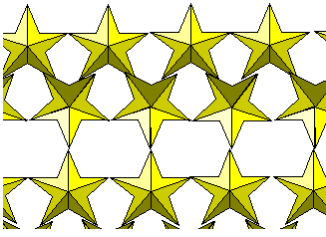
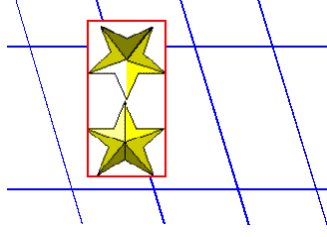
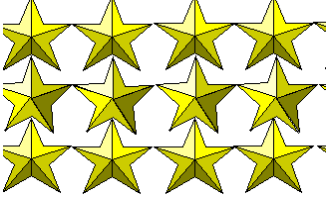
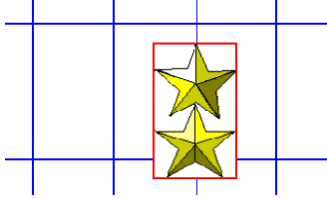
Identifikation von Gitter und Basis

Finden Sie für die nachfolgenden *Kristalle* das *Gitter* und die *Basis* (Kleine Unterschiede in den Sternen nicht beachten!).

Hier die Lösung:

Gezeigt ist immer nur *eine* der möglichen Kombinationen.

Illustration

Kristall	=	Gitter + Basis
	=	
	=	
	=	
	=	
	=	

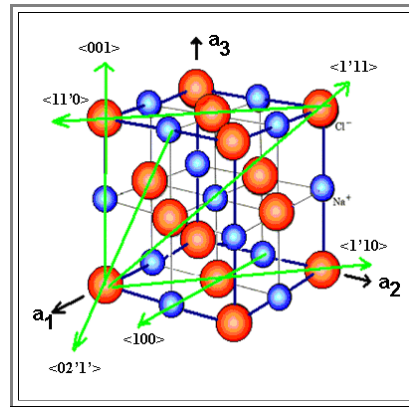
Lösungen zur Übung 3.2-1

Richtungen im Gitter

Illustration

Indiziere die gezeigten Richtungen des flächenzentrierten Bravais Gitters.

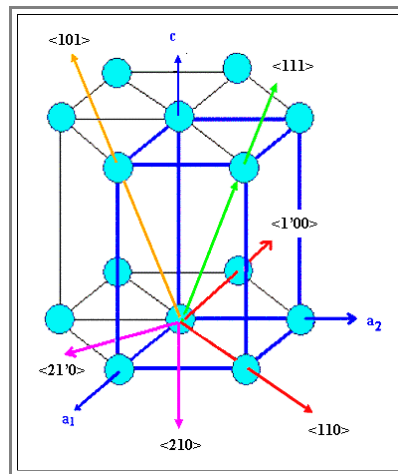
Hier ist die korrekte Indizierung:



- Nicht vergessen, dass man immer erst den Ursprung der Koordinatensystems, d.h. den Nullpunkt der Basisvektoren in den "Beginn" eines Richtungsvektors legen muß.
- Oder eben die Richtung solange verschieben, bis sie durch den Ursprung läuft.

Hexagonales Bravais Gitter. Fällt Ihnen etwas auf?

Hier ist die korrekte Indizierung:

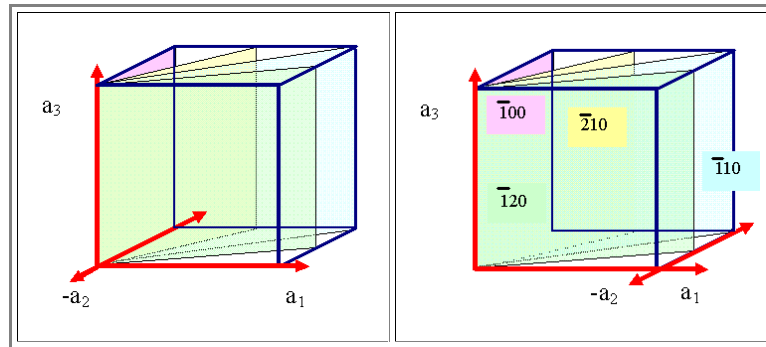


- Auffällig ist, dass kristallographisch **gleichwertige** Richtungen (z.B. **<110>** und **<1'00>**) einen **verschiedenen** Typus der Indizes haben, und kristallographisch **verschiedene** Richtungen (z.B. **<101>** und **<110>**) **denselben** Typus zeigen.
- Wie man dieses Problem bei einem sehr gebräuchlichen Gitter elegant lösen kann, ist in einem extra Modul und in einer speziellen Übungsaufgabe erklärt.

Lösungen zur Übung 3.2-2

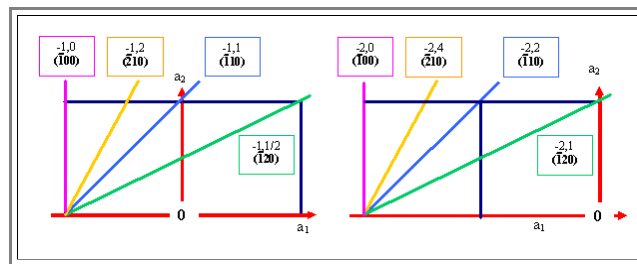
Illustration

- Indiziere die markierten Ebenen und Ebenenscharen im gegebenen Koordinatensystem
- Hier ist die korrekte Indizierung:



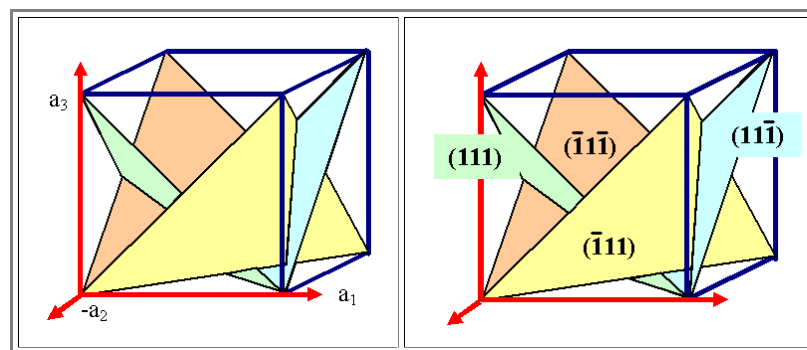
- Wie kommt man auf diese Lösung? Nun gut, einmal langsam zum Mitdenken:

- Zuerst verschieben wir den Nullpunkt, so dass er nicht mehr auf der zu indizierenden Ebene liegt. das ist oben rechts schon angedeutet.
- Um die Schnittpunkte genau zu bestimmen, betrachten wir jetzt einfach nur die Projektion auf die **a₁/a₂** Ebene (mit zwei verschiedenen Ursprüngen). Das reicht bei der ersten Aufgabe aus, da die Schnittpunkte aller Ebenen mit **a₃** alle bei ∞ liegen; der dritte Index ist also immer = 0

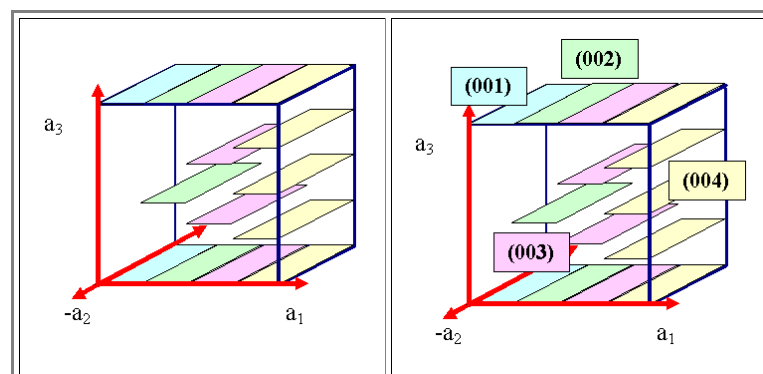


- Es ist jetzt klar, dass man immer dieselben Miller Indizes erhält.

- Hier die Lösung der nächsten Aufgabe:



- Jetzt noch die Sache mit den Ebenenscharen



- Woher weiß man eigentlich, wenn nur eine Ebene eingezeichnet ist, welche der ∞ vielen möglichen Ebenenscharen gemeint ist?

- Einfach: Man weiß es *nicht* und nimmt automatisch die kleinstmöglichen Integers als Miller Indizes, das heißt man "kürzt" im Zweifelsfall.
- Das ist aber *nur* zulässig, wenn es *nicht* drauf ankommt, welche Schar genau man anspricht. Sobald wir mit Miller Indizes *rechnen* (bei der Beugung von Wellen am Kristall), kommt es sehr wohl darauf an, ob z.B. die **{111}** oder die **{222}** Ebenen involviert sind!

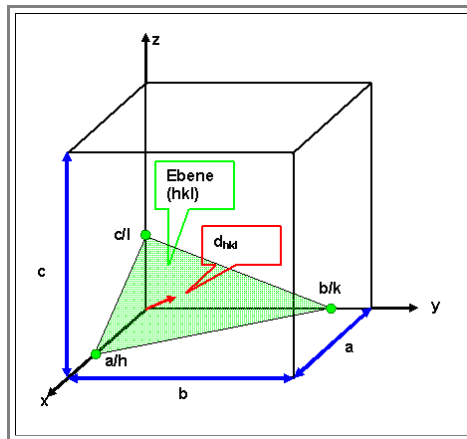
Lösung zur Übung 3.2-3

Zeige, dass für ein orthorhombisches Bravaisgitter, die Ebenen mit der Miller Indizierung $\{hkl\}$ folgenden Abstand d_{hkl} haben

$$d_{hkl} = \frac{1}{\{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2\}^{1/2}}$$

Illustration

Entscheidend ist eine sinnvolle Zeichnung:



Das Gitter ist im Prinzip orthorhombisch, auch wenn es ziemlich kubisch aussieht. Die grüne Ebene hat *beliebige* Indizes $h, k, l > 1$. Dadurch liegen die Schnittpunkte in der **EZ**. Entscheidend ist, dass man folgende Zusammenhänge erkennt:

1. Der Abstand zur nächsten Ebene der durch $\{hkl\}$ definierten Ebenenchar ist durch die Länge des roten Vektors gegeben, der vom Ursprung ausgeht und senkrecht auf $\{hkl\}$ steht. Denn der Ursprung liegt immer auf einer Ebene der Ebenenschar.
2. Die Länge der Strecken vom Ursprung zu den Schnittpunkten der Ebene mit den Achsen ist $a/h, b/k$, bzw. c/l . Das folgt direkt aus der Definition von h, k und l , die ja reziprok die Schnittpunkte in Einheiten der Gitterparameter angeben.

Der Rest ist jetzt Geometrie.

- Zunächst berechnen wir, wie lang der rote Vektor d_{hkl} ist. Dazu definieren wir die Winkel, die er mit den Koordinatenachsen bildet als α_x, α_y und α_z .
- Für die aus Ursprung, Endpunkt von d_{hkl} , und den Schnittpunkten mit den Koordinatenachsen gebildeten Dreiecke gilt

$$d_{hkl} = \frac{a}{h} \cos \alpha_x = \frac{b}{k} \cos \alpha_y = \frac{c}{l} \cos \alpha_z$$

Wenn man sich jetzt an die Eulersche Beziehung zwischen den Cosinüssen erinnert, liegt nahe, die Terme zu quadrieren und dann zu addieren. Wir erhalten

$$\cos^2 \alpha_x + \cos^2 \alpha_y + \cos^2 \alpha_z = 1 = (d_{hkl})^2 \cdot \left((h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2 \right)$$

Eulersche Beziehung

Damit sind wir fertig. Für den gesuchten Abstand d_{hkl} ergibt sich

$$d_{hkl} = \frac{1}{\{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2\}^{1/2}}$$

q.e.d.

Die im [Rückgrat gegebene Formel](#) für kubische Gitter erhält man sofort durch die dann gültige Beziehung $a = b = c = a_0$ zu

$$d_{hkl}(\text{kubisch}) = \frac{a_0}{(h^2 + k^2 + c^2)^{1/2}}$$

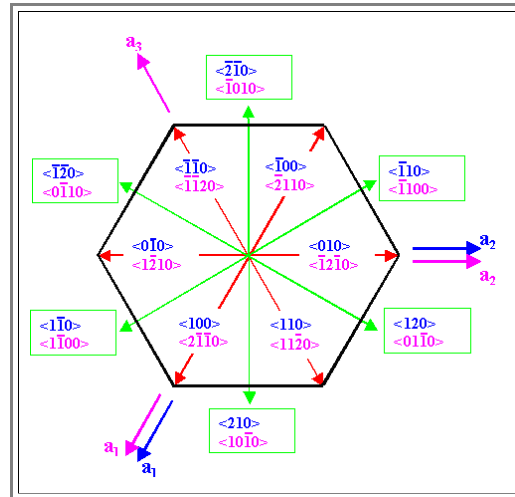
Lösungen zur Übung 3.2-4

Illustration

Indiziere die gezeigten Richtungen in der Basisebene des hexagonalen Bravais Gitters.

Gezeigt sind zunächst die Richtungen in der Basisebene.

- Es gibt jeweils **6** kristallographisch gleichwertige Richtungen; das ist am besten in der Projektion des Gitters auf die Basisebene zu sehen.
- Die Indizierung aller Richtungen in **blauen** Dreiersystem ist (relativ) einfach; alle Miller Indizes sind eingezeichnet.



- Die Dreierindizierung zeigt die kristallographische Gleichwertigkeit der **roten** und **grünen** Richtungen **nicht**; es treten die Typen **[100]**; **[110]** und **[210]**; **[110]** auf.

In der **rosa** "Vierer"-Indizierung gilt für die neuen Indizes **<u,v,t,w>** im System der **rosa** Achsen

$$u = 1/3 (2U - V)$$

$$v = 1/3 (2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$

- Damit erhält man für **<u,v,t,w>** der **rosa** Richtungen in der Viererindizierung zum Beispiel

$$<U,V,W> = <100>$$

$$<U,V,W> = <110>$$

$$<U,V,W> = <010>$$

$$u = 1/3 (2 \cdot 1 - 0) = 2/3$$

$$1/3 (2 \cdot 1 - 1) = 2/3$$

$$1/3 (0 - 1) = -1/3$$

$$v = 1/3 (0 - 1) = -1/3$$

$$1/3 (2 \cdot 1 - 1) = 2/3$$

$$1/3 (2 - 0) = 2/3$$

$$t = -(2/3 - 1/3) = -1/3$$

$$-(2/3 + 2/3) = -4/3$$

$$-(-1/3 + 2/3) = -1/3$$

$$w = 0$$

$$= 0$$

$$= 0$$

Auf ganze Zahlen gebracht haben wir also

- $<U,V,W> = <100> \Rightarrow <u,v,t,w> = <2, 1', 1', 0>$
- $<U,V,W> = <110> \Rightarrow <u,v,t,w> = <1, 1, 2', 0>$
- $<U,V,W> = <010> \Rightarrow <u,v,t,w> = <1', 2, 1', 0>$

- Dekliert man alle Möglichkeiten für die roten Richtungen durch, erhält man die oben eingezeichneten Viereindizierungswerte und es ist klar, dass in der Viererindizierung **alle** rote Richtungen vom **[112 0]** Typ sind.

- Außerdem wird bei näherer Betrachtung der Indizes und Ausführung der darin enthaltenen Vorschrift zur Generation eines Vektors im Vierersystem auch klar, dass sie grundsätzlich einen Vektor der Länge "3" bzw. "2" erzeugen. Mit ein bisschen Übung kann man die Viererindizierung dann auch direkt ablesen.

Was ergeben die grünen Richtungen vom Typus $[120]$ und $[110]$?

- Das kann nun jeder selbst durch-x-en; was man erhält ist oben eingezeichnet.

Lösung zu: Ein bißchen Geometrie zu Gittern

Wie groß ist die Gitterkonstante a des **fcc** und **bcc** Gitters ausgedrückt in Atomradien r ?

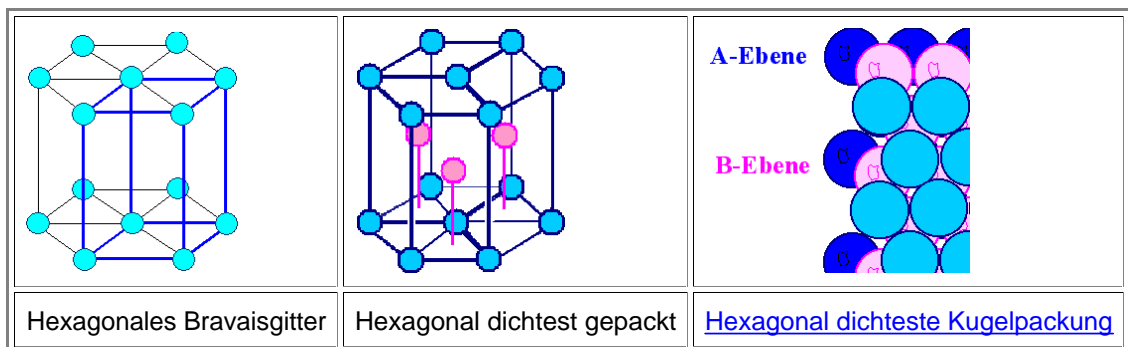
Ein Blick auf die [Bravais Gitter](#) klärt die Geometrie:

- Der kleinstmögliche Abstand zwischen zwei Gitterpunkten muß gleich dem doppelten Atomradius r sein, denn näher können sich zwei Gitterpunkte nicht kommen sobald wir auf jeden Gitterpunkt ein kugelförmiges Atom mit Radius r setzen.
- In **fcc** Gitter findet sich der kleinstmögliche Abstand offenbar entlang der Flächendiagonale, also entlang einer $\langle 110 \rangle$ Richtung.
- Im **bcc** Gitter ist es die Raumdiagonale, also die $\langle 111 \rangle$ Richtung.
- Damit gilt

fcc	bcc
$2a^2 = 16 r^2$	$3a^2 = 16 r^2$
$a = \frac{4r}{2^{1/2}}$	$a = \frac{4r}{3^{1/2}}$

Wie groß ist das Achsenverhältnis c/a für das hexagonale Gitter, falls ein Kristall mit dichtester Kugelpackung erzeugt werden soll?

Ein Blick auf das hexagonale Bravaisgitter klärt die Geometrie:



Beide hexagonale Basisebenen sind, in der Nomenklatur der dichtesten Kugelpackung, **A**-Lagen. Wir brauchen auf jeden Fall eine Basis mit zwei identischen Atomen, um die für die dichteste Kugelpackung notwendige **B**-Lage erzeugen zu können. Damit haben wir die Beziehungen:

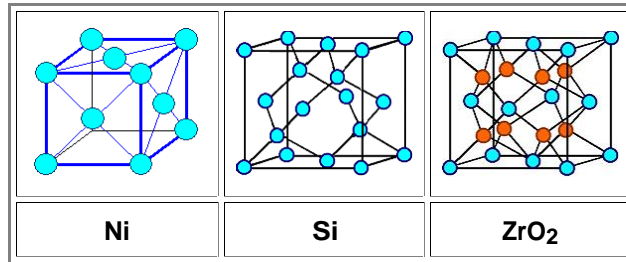
- Wir haben **2** Atome pro **EZ** ($8 \cdot 1/8 + 1$).
- Atomradius (= Kugelradius) $r = a/2$.
- Volumen der **EZ** = $a^2/2 \cdot 3^{1/2} \cdot c$
- [Packungsdichte](#) **PD** = **0.74**

Damit gilt

$$\begin{aligned}
 \text{PD} = 0.74 &= \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi r^3}{a^2/2 \cdot 3^{1/2} \cdot c} = \frac{16 \cdot \pi r^3}{3 \cdot a^2 \cdot 3^{1/2} \cdot c} = \frac{2 \cdot \pi a}{3 \cdot 3^{1/2} \cdot c} \\
 c &= \frac{2 \cdot \pi a}{3 \cdot 3^{1/2} \cdot 0.74} = 1.633 a \\
 &\text{q.e.d.}
 \end{aligned}$$

Wieviel Atome enthält die Elementarzelle von **Ni**, **Si**, **ZrO₂**? Die Kristalle sind unten gezeigt; die Antwort ist durch Abzählen zu erhalten.

Wieviele Atome hat die jeweilige Basis?



Hier eine tabellarische Übersicht:

	Ni	Si	ZrO₂
Eckatome	$8 \cdot 1/8 = 1$	$8 \cdot 1/8 = 1$	$8 \cdot 1/8 = 1$
Flächenatome	$6 \cdot 1/2 = 3$	$6 \cdot 1/2 = 3$	$6 \cdot 1/2 = 3$
Volumenatome	0	4	8
Summe	4	8	12
Atome in Basis (Koordinaten)	1 (0,0,0)	2 (0,0,0) (1/4, 1/4, 1/4)	3 (0,0,0) (1/4, 1/4, 1/4) (1/4, 3/4, 1/4)

Die Gitterkonstanten von **Ni**, **Pb** und **Si** sind **3,52 Å**, **4.95Å** und **5.43Å**. Wie groß ist die Dichte?

Auch hier ist eine Tabelle angebracht

	Ni	Pb	Si
Atomgewicht (G_A) ($\times 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg)	58,7	207.2	28.1
Atome in EZ (A_{EZ})	4	4	8
Gitterkonstante	3,52 Å	4.95Å	5.43Å
Volumen EZ (V_{EZ})	$(3,52 \text{ Å})^3$ 43,6 Å ³ $4,36 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$	$(4.95 \text{ Å})^3$ 121.3 Å ³ $1,21 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3$	$(5.43 \text{ Å})^3$ 160.1 Å ³ $1,60 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3$
$\text{Dichte } \rho = \frac{G_A \cdot A_{EZ}}{V_{EZ}}$			
ρ [g · cm⁻³]	8.93	11.37	2.33
Wert aus Tabelle	8.91	11.34	2.33

Das ist nicht schlecht! Die kleinen Diskrepanzen könnte von der unspesifizierten Temperatur herrühren (**a** ist eine Funktion der Temperatur!) oder von den in realen Metallen (nicht im Silizium) immer vorhandenen Defekten, die immer die lokale Dichte etwas erniedrigen.

Vergleiche die Dichte von **Si** in einem **Si** Kristall mit der Dichte des **Si** (und nur des **Si**!) in einem **SiO** (= Quarz) Kristall.

Was folgt daraus für die Oxidation von **Si**? Bedenke, dass Sauerstoff durch die bereits gebildete **SiO₂** Schicht diffundieren muß und dann durch "Eindringen" in das **Si** Gitter **SiO₂** bildet.

- Der erste Teil ist kompliziert, aber nicht schwierig, und wird hier nicht ausgeführt.
- Das richtige Ergebnis wäre, dass die partielle Dichte nur des **Si** in **SiO₂** etwa die Hälfte der Dichte von reinem **Si** beträgt.
- Was folgt daraus für die Oxidation von Silizium? Das ist die schwierige Frage; die Antwort hat erhebliche Bedeutung für die Mikroelektronik!
- Si** oxidiert, falls es Sauerstoff ausgesetzt ist und man eine hinreichend hohe Temperatur hat. Sauerstoff reagiert mit dem **Si** zu **SiO₂** und bildet eine homogene Oxidschicht.
 - Die einzige Möglichkeit die Schichtdicke zu erhöhen ist offenbar, dass Sauerstoff durch die bereits gebildete Oxidschicht "diffundiert" und dann an der Grenzfläche **Si - SiO₂** zu mehr Oxid reagiert.
 - Ein Volumenelement **Si** das derart oxidiert produziert dann unvermeidlich etwa **zwei** Volumenelemente Oxid, denn die Zahl der **Si** Atome ändert sich ja nicht, aber die Dichte ist nur halb so groß.
- Si** Oxidation produziert also immer eine erhebliche Volumenvergrößerung - und das macht jede Menge Probleme in der Mikroelektronik!

Lösungen zur Übung 3.3-2

Die {111} Ebenen in der <110> Projektion

Illustration

Zeichne die Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer <110> Richtung.

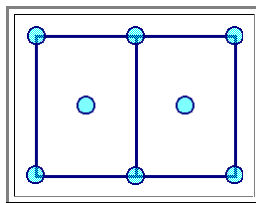
- Zeichne in diese Projektion die beiden {111} Ebenen ein, die die Projektionsrichtung enthalten
- Betrachte die Stapelfolge auf diesen {111} Ebenen.

Es ist sehr lehrreich, sich mit Gitterprojektionen zu beschäftigen; d.h. die dreidimensionale Anordnung von Gitterpunkten (oder Atomen im Kristall) auf eine zweidimensionale Ebenen zu projizieren.

- Zunächst sollte man erkennen, daß dann zwei der vier {111} Ebenen zu "Strichen" mutieren.
- Hier die Lösung Schritt für Schritt. Es ist hilfreich, dabei einen Würfel zu betrachten und in die richtigen Richtungen zu drehen.

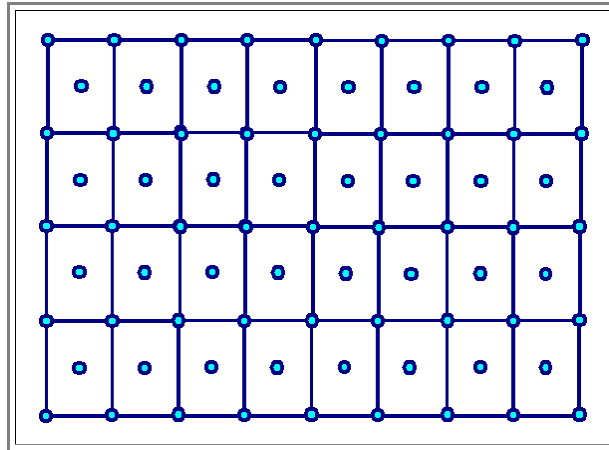
Die Projektion eines Würfels mit Seitenlänge a entlang einer <110> - Richtung, d.h. entlang einer *Flächendiagonalen* ergibt ein Rechteck mit Seitenlänge a und $a \cdot \sqrt{2}$.

- Wenn man die Gitterpunkte des **fcc** Bravais Gitters mit kleinen Kreisen markiert, sieht das so aus:



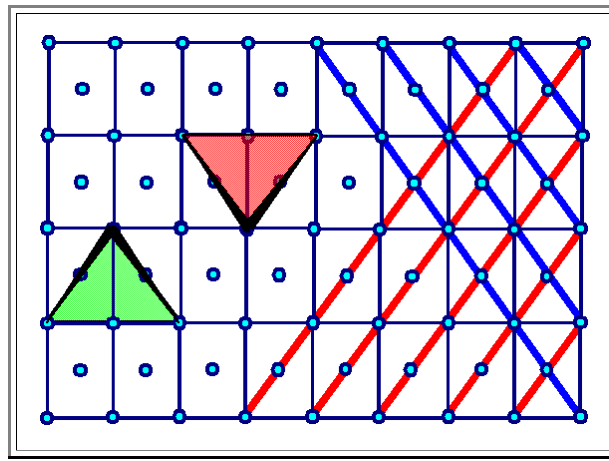
- Alle Gitterpunkte liegen exakt übereinander und erscheinen in der Projektion als ein Punkt.

Erzeugt man mit dieser Elementarzelle ein *Gitter*, erhält man folgendes Bild:



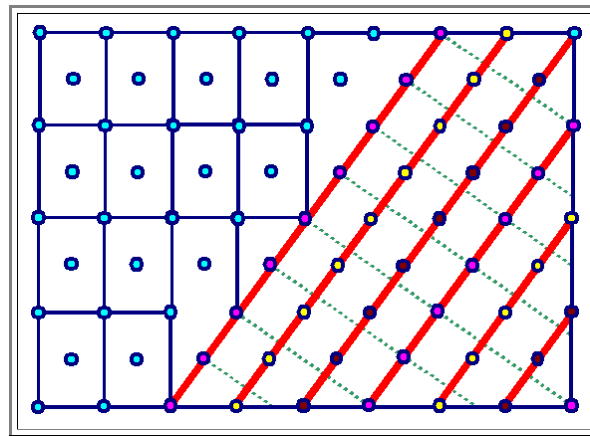
Es gibt 4 {111} Ebenenscharen. Zwei davon stehen senkrecht zur Zeichenbene, erscheinen also als (rote bzw. blaue) Strichesysteme

- Zwei {111} Ebenenscharen liegen schräg; sie sind "perspektivisch" angedeutet. In der Zeichnung läuft die jeweilige Ebene vom dicken Teil der schwarzen Umrandungsstriche jeweils "nach unten".



Um die Stapelfolge auf der $\{111\}$ Ebene zu erhalten, greifen wir uns eine Ebenenschar heraus und betrachten die Abfolge der Gitterpunkte senkrecht zu dieser (111) Ebene.

- Die grünpunkteten Linien sind Hilfslinien; sie stehen senkrecht auf der herausgegriffenen (111) Ebene.



- Die Stapelfolge ist offensichtlich **ABCABCABC...**. Die Verschiebung der jeweiligen Lagen in der (111) - Ebene ist $a/6 \langle 112 \rangle$ - [wie es sein muß!](#)
- Das **fcc** - Gitter ist damit, *wie behauptet*, ein *dichtest gepacktes Gitter* mit der Stapelfolge **ABCABC...**

Lösungen zur Übung 3.3-3

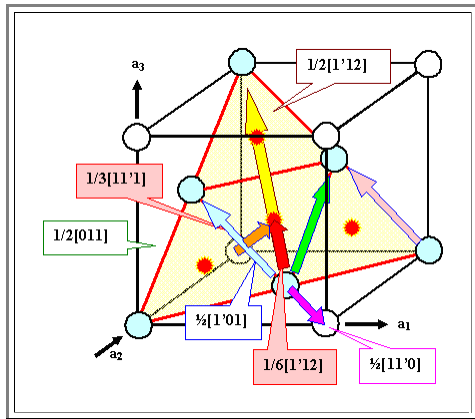
Die Basisvektoren beim Stapeln von $\{111\}$ Ebenen

Illustration

Zeigen Sie, daß folgende Aussagen richtig sind:

- Der Vektor, der eine Atomlage (z.B. die **B** - Lage) durch eine Verschiebung in der $\{111\}$ Ebenen in die jeweils andere mögliche Ebene überführt (im Beispiel wäre das eine **C** - Ebene), ist von der Form $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$
- Der Vektor der von einer $\{111\}$ Ebene zur darüber- oder darunterliegenden $\{111\}$ Ebene führt, ist von der Form $\mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$

Das kann man auf viel Weisen zeigen; wir wählen den simplen, aber zeichnerisch aufwendigen Weg



- Gezeigt ist zunächst die **fcc** Einheitszelle; weiterhin ist eine $\{111\}$ Ebene eingezeichnet
- Die Atome der nächsten $\{111\}$ Lage sitzen in den "Kuhlen" der eingezeichneten Ebene; diese entsprechen in einer senkrechten Projektion den roten Sternen.
- Die gesuchten Verschiebungsvektoren entsprechen also
 - dem **roten** Vektor von einem blauen Atom/Gitterpunkt zu einem roten Stern (Verschiebung in der $\{111\}$ Ebene).
 - dem **orange** Vektor vom z.B. dem hinten unten links liegenden Eckatom zum senkrecht darüberliegendem roten Stern.

Diese Vektoren lassen sich einfach in der in der gezeigten Art aus $\mathbf{a}/2\langle 110 \rangle$ Vektoren konstruieren:

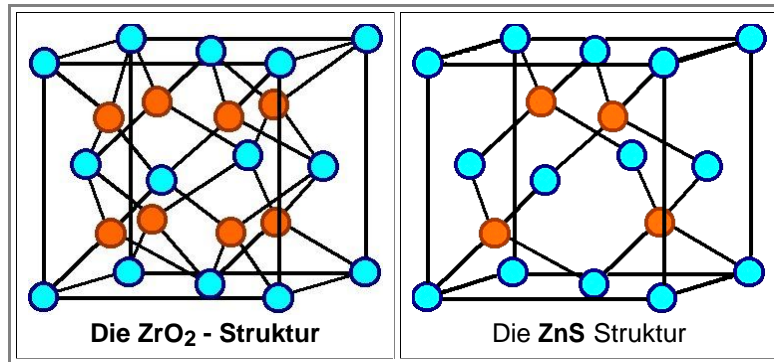
- Die Summe des hellblauen und grünen $\mathbf{a}/2\langle 110 \rangle$ Vektors ist gerade das dreifache des gesuchten **roten** Vektors, man erhält sofort den Typus $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$
- Den gesuchten **orange** Vektor erhält man indem man den violetten $\mathbf{a}/2\langle 110 \rangle$ Vektor zum bereits bestimmten $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$ Vektor addiert; es ergibt sich der Typus $\mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$.

Lösungen zur Übung 3.3-4

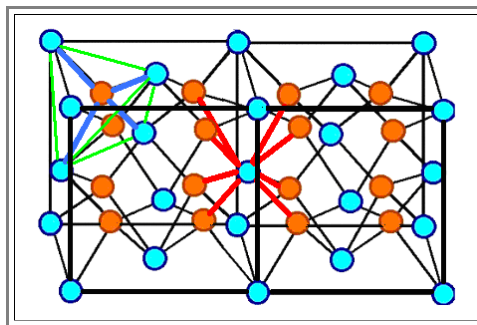
Der Kristallstrukturtyp von ZrO_2 (Kubisches Zirkonoxid)

Illustration

- Gehört der ZrO_2 Kristall zur Gruppe der Kristalle mit [ZnS - Struktur](#)? Was ist das Bravaisgitter? Wie sieht die Basis aus? Was macht den Unterschied zum GaAs ?
- Vergleichen wir erst mal die beiden Kristalltypen



- Die blauen Atome "passen". Das Bravaisgitter ist also identisch: Wir haben ein **fcc** Gitter.
- Aber es gibt doppelt so viele (Sauerstoff)atome links wie "innere" Atome rechts.
 - Wir haben also beim ZrO_2 **zwei** Sauerstoffatome in der Basis, eines - wie bei der ZnS Struktur bei $(1/4, 1/4, 1/4)$, das zweite sitzt bei $(1/4, 3/4, 1/4)$.
 - Wir haben also **keine** ZnS Struktur.
- Die Bindungsstruktur ist im übrigen auch völlig anders.
 - Während im GaAs jedes **Ga** oder **As** Atom immer vier nächste Nachbarn der jeweils anderen Sorte hat, sieht ein **Zr** Atom **8** nächste Sauerstoffnachbarn, während ein Sauerstoffatom im Zentrum eines Tetraeders aus **4** **Zr** Atomen sitzt.
 - Das ist nicht ganz leicht zu sehen; das Bild unten hilft.

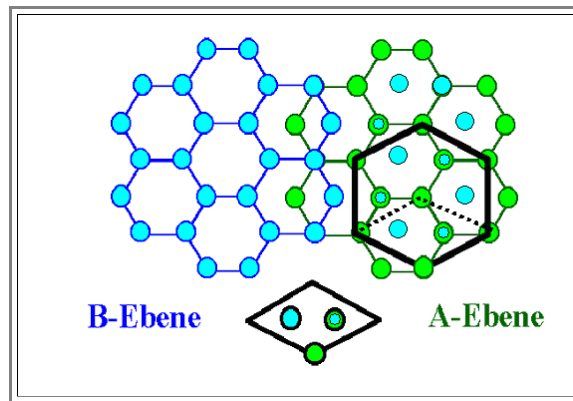


Lösungen zur Übung 3.3-5

Hat Graphit eine hcp-Struktur?

Illustration

- Was ist die Elementarzelle und die Basis für Graphit?
- Nennen wir die zwei nicht aufeinanderfallenden Ebenen die **A**- und **B**-Ebene.
- Von oben gesehen sieht die Struktur dann so aus:



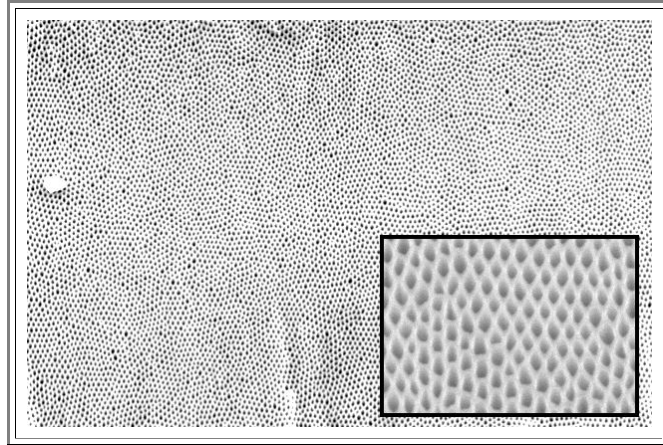
- Man erkennt, daß man die **EZ** größer machen muß; die grundlegende hexagonale Struktur ist schwarz eingezeichnet.
- Die **EZ** hat also *vier* Atome in der Basis.
- Bezüglich der *Atome* ist die Struktur dichtgepackt - die **B**-Ebene sitzt "auf" Lücke
- Bezüglich des *Gitters* macht die Frage nach dichtester Packung eigentlich keinen Sinn. Wir können aber fragen, ob die hier vorliegende Verschiebung der **B**-Ebenen relativ zur **A**-Ebene identisch ist mit der im einfachen **hcp**-Gitter.
- Im einfachen **hcp**-Gitter ist die Verschiebung $\frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ (mit dem 60° Winkel zwischen den Basisvektoren).
- Das gilt hier offenbar auch - Graphit hat eine **hcp**-Struktur.

Porengitter und Radiale Verteilungsfunktion in InP

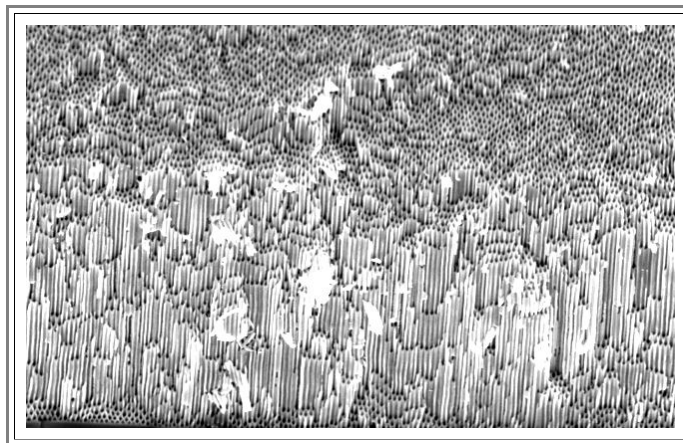
Advanced

In vielen Halbleitern kann man durch geeignete elektrochemische Ätzverfahren kleine Löcher oder Poren ätzen - wie das genau funktioniert ist nicht besonders gut verstanden und Gegenstand laufender Forschung.

- Typische Poren haben Durchmesser um $1\ \mu\text{m}$ herum, und können viele $100\ \mu\text{m}$ tief werden. Normalerweise sind sie regellos verteilt, bilden also eine Art amorphe Struktur wie im [Rückgrat gezeigt](#) - wir müssen nur statt der Kugeln = Atome jetzt Poren (von oben gesehen) vorstellen.
- Eine ganz heiße Entdeckung wurde **2001** von Sergiu **Langa** gemacht; ein Doktorand am Lehrstuhl, als es ihm gelang besonders schöne Poren mit *selbstorganisierter Kristallinität* in **InP** zu ätzen. Dies ist im untenstehenden Bild gezeigt.

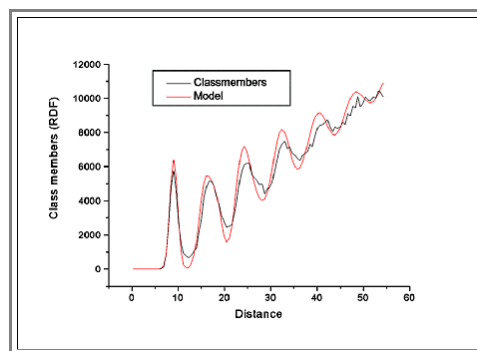


Hier noch, weil es so ein tolles Bild ist, ein Bruch quer durch die Poren



Ist das jetzt ein *Kristall*? Der vergrößerte Ausschnitt im ersten Bild sieht jedenfalls streckenweise sehr danach aus.

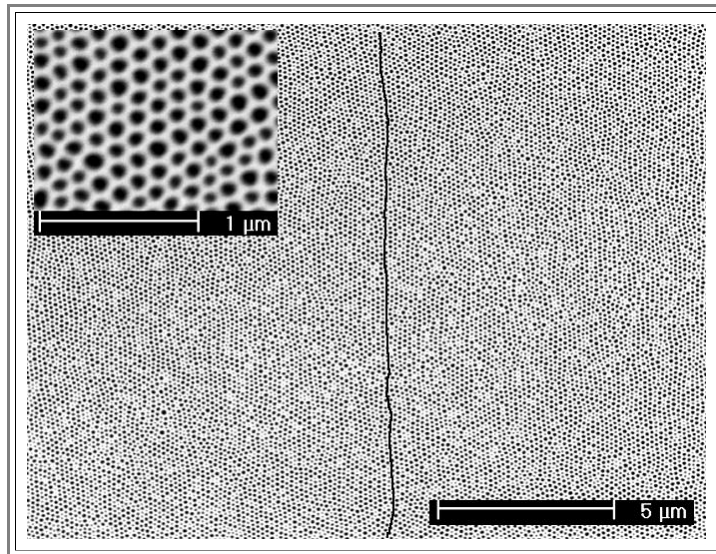
- Aber so ganz paßt das Bild nicht zur [strengen Definition](#) "Aus der *bekannten Position einiger* Atome läßt sich die Position *aller anderen Atome* berechnen".
- Schauen wir uns also die [radiale Verteilungsfunktion](#) an:



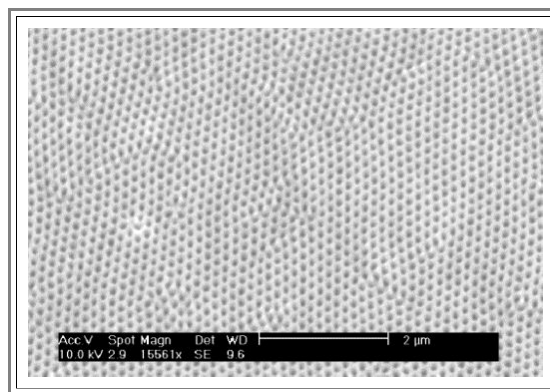
- Die schwarze Kurve zeigt die Meßwerte; die rote ist ein Fit und hier nicht interessant.

Was wir sehen ist, daß man von einem beliebigen Nullpunkt ausgehend, zwar keine Aussagen mehr machen kann wo man *weit weg* eine Pore finden wird, aber immerhin noch bis zum **5.** und **6.** Nachbarn eine Nahordnung vorhanden ist.

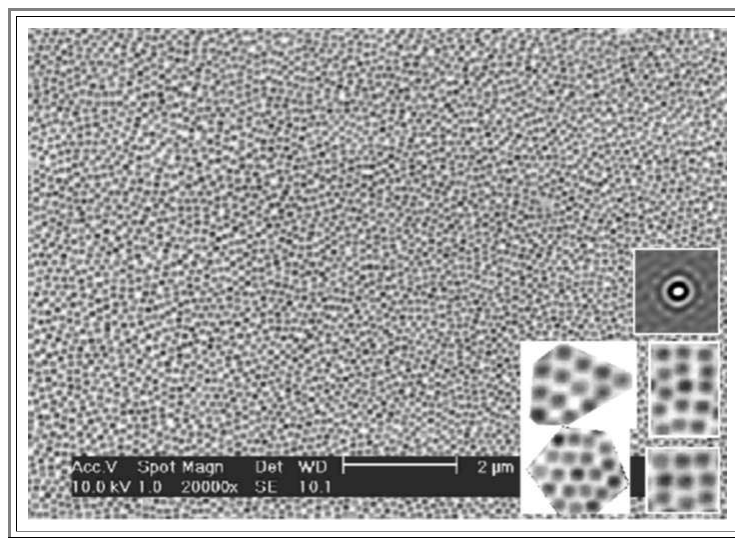
- In der Praxis reicht das um von einem **Porenkristall** zu reden! Natürlich ist es ein **Poly**kristall, aber wir haben **keine** amorphe Anordnung.
- Die spannende Frage ist natürlich: **Warum?** **Warum** wachsen überhaupt Poren, **warum** werden die Poren alle ungefähr gleich groß, und **warum** ordnen sie sich halbwegs regelmäßig an?
- Wie wissen sie voneinander, denn nur durch irgendeine Wechselwirkung zwischen den Poren kann eine solche **selbstorganisierte** Struktur entstehen.
- Noch eine Frage: Wie, um nagelneue Forschung (**2002**) einzubringen entsteht ein Poren**eink**kristall - hier gezeigt:



- Zugegeben, kein besonders toller Einkristall; er ist voller Defekte.
Das es aber tatsächlich ein Einkristall ist - der erste seiner Art übrigens - erkennt man, wenn man einer Gitterrichtung über größere Distanzen folgt wie mit der schwarzen Linie angedeutet.
- Die Forschung geht weiter: Mit optimierten Bedingungen kann man jetzt (Anfang **2003**) schon einen recht guten Einkristall herstellen, bei dem der Einkristallinität auch sofort ins Auge sticht:



- Die Forschung geht weiter.....
- Herrn Lölkes, ebenfalls Doktorand am Lehrstuhl, ist es gelungen (Mitte **2003**) die **InP** Verhältnisse auf Silizium zu übertragen. Aber nur im Prinzip. Im Detail ergibt sich etwas völlig neues, wie unten gezeigt



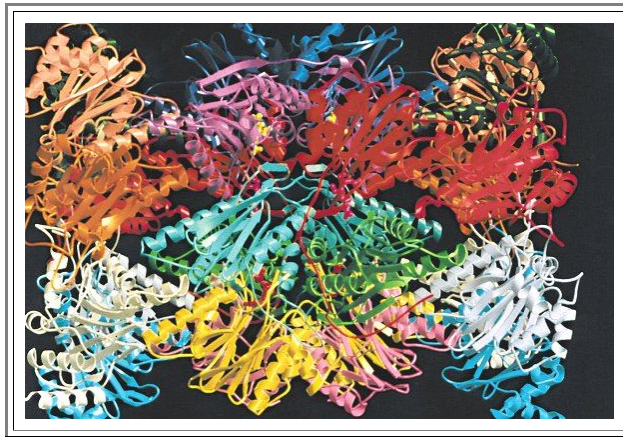
Wir haben einen sogenannten "**frustierten Kristall**", eine spezielle Struktur, die bisher allenfalls einigen Mineralogen und Magnetikern bekannt war.

- Kurz gesagt, können sich die Poren nicht entscheiden, ob sie ein quadratisches oder hexagonales Gitter bilden wollen; die Ausschnitte zeigen entsprechende Detailstrukturen.
- Die Gesamtstruktur ist nun aber nicht amorph, sondern zeigt eine spezielle radiale Verteilung; dies ist in der "Autokorrelationsfunktion" sichtbar (eine Art zweidimensionale radiale Verteilungsfunktion; Einsatz oben): Die nächsten Nachbarn sind kaum miteinander korreliert, (gleichförmiger heller Ring um Zentrum), wohl aber die zweitnächsten (10 helle und zwei nicht so helle Maxima im zweiten Ring).

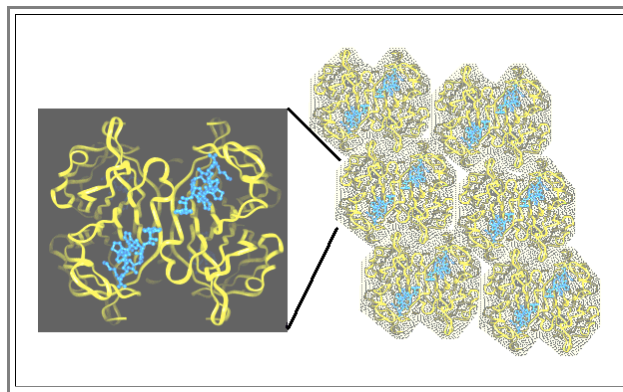
Komplizierte Kristalle

Advanced

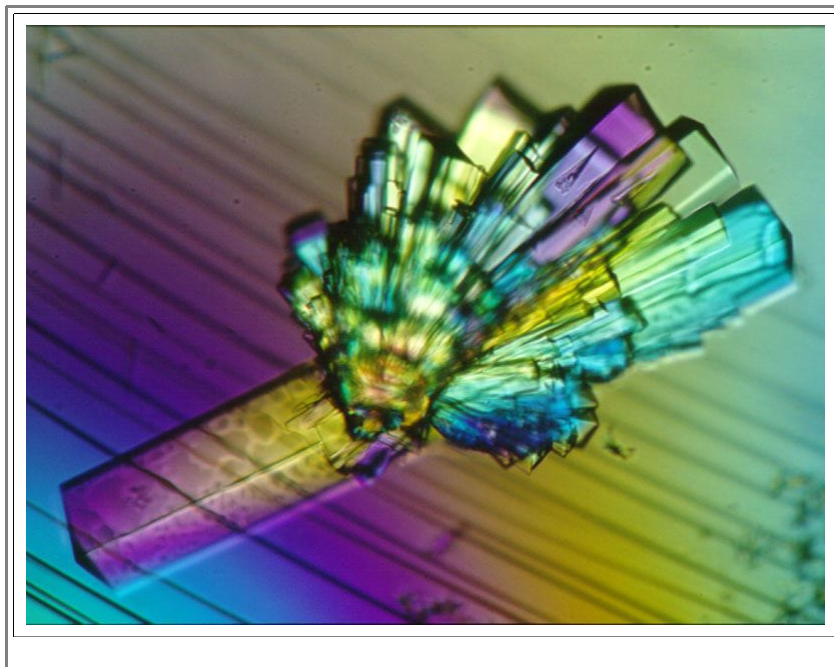
- Zunächst schauen wir uns mal eine komplizierte Basis an, die im DESY / Hasylab entschlüsselt wurde (und woher auch die Bilder stammen)



- Das ist ein einziges Eiweißmolekül, wobei die Kohlenstoffketten mit allem was daran hängt noch stilisiert als "Band" gezeichnet ist. Es ist ein sogenanntes "Proteasome", das als eine Art Abfallbeseitiger in Zellen tätig ist.
- Wir machen einen Proteinkristall indem wir ein passendes Gitter nehmen, und auf jeden Gitterpunkt so ein Monstrum legen.
- Das sieht für ein wesentlich einfacheres Molekül dann schematisch so aus:



- Man macht das auch nicht nur als Gedankenexperiment! Die gezeigten Strukturen sind nämlich erst über den Umweg der Proteinkristallbau überhaupt ermittelbar!
- Primitiv ausgedrückt, muß man um die Struktur eines Riesenmoleküls zu ermitteln, in irgendeiner Art und Weise etwas messen - z.B. was man erhält, wenn man mit Röntgenstrahlung auf das Molekül losläßt. Dazu schaut man zum Beispiel nach, wieviel Intensität der einfallenden Strahlung in welche Richtung "gebeugt" wird.
- Hat man aber nur *ein* Molekül, wird man kein großes Signal bekommen. Hat man viele, die aber wirr durcheinander liegen (d.h. eine amorphe Struktur haben), bekommt man nur gemittelte Signale, die kaum mehr Informationen enthalten.
- Hat man aber einen möglichst perfekten Kristall, macht jedes Molekül dasselbe, und die Signale addieren sich - Messungen werden möglich.
- Proteinkristalle zu züchten ist eine hohe Kunst; das folgende Bild zeigt ein Exemplar; ebenfalls aus dem DESY / Hasylab.

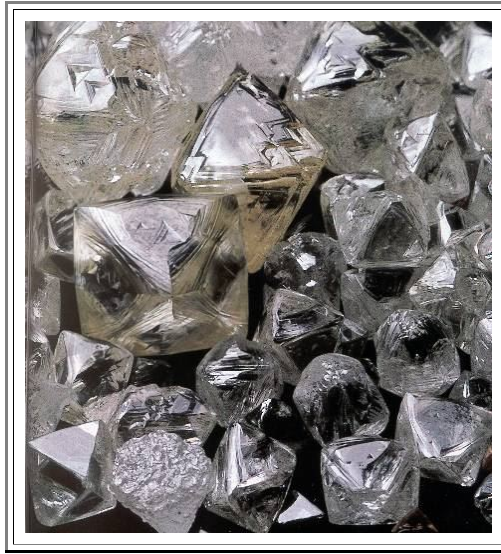


● Bilder mit freundlicher Genehmigung von [DESY /Hasylab](#).

Rohdiamanten

Advanced

Hier sind ein paar echte Rohdiamanten. Daß es Kristalle sind, kann man direkt sehen.



- Wieso wohl sind es *Oktaeder* und keine *Würfel*, wo sie doch *kubische* Symmetrie haben? Hier ist ein Detailbild. Können Sie herausfinden, welche kristallographischen Ebenen offenbar die bevorzugten Oberflächen sind?



- Auflösung (teilweise) im Link. Aber erst nach eigenem Nachdenken betätigen!

Gitterkonstanten

Hier Tabellen mit dem Gitterkonstanten der wichtigsten Kristalle

Many more numbers can be found in the modules of the "[periodic table](#)".

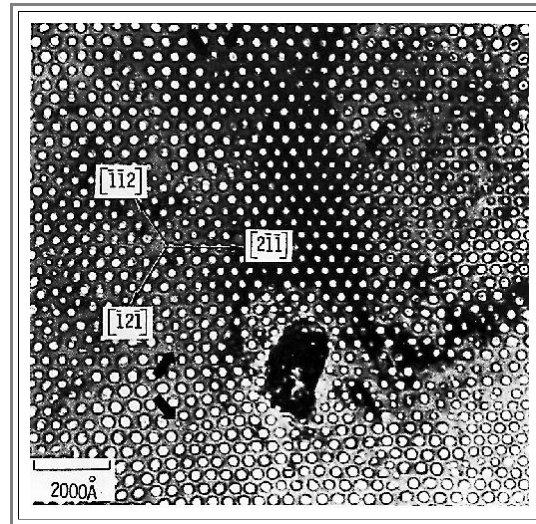
Advanced

fcc a [Å]		bcc a [Å]		hex a, c [Å]	
Ag	4.08			Be	2.29
Al	4.04	Cs	2.67	Cd	2.97 5.61
		Cr	2.89	Co	4.07 2.51
Au	4.08	K	5.32		
Cu	3.61	Li	3.51		
Ge	5.66	Fe	2.86		
		Mo	3.15	Mg	3.20
Ni	3,52	Nb	3.30		
Pb	4.95	Na	4.28	Zn	5.82 3.18
Pt	3.92				
Si	5.43	Rb	5.62		
		Ta	3.30		
		V	3.03		
		W	3.16		

Void Gitter

Das **TEM** Bild (von **W. Jäger**) zeigt kleine **He**-voids in einem Metallkristall; entstanden durch Beschuß mit **He** Ionen.

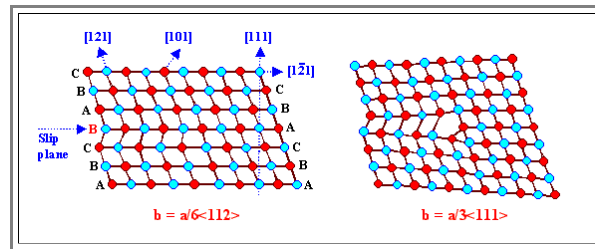
- Die Voids haben sich in einem *hexagonalen Gitter* angeordnet - warum und wie ist eine nicht einfach zu beantwortende Frage.
- Das Voidgitter enthält Strukturen, die Stufenversetzungen entsprechen. Können sie endende "Netzebenen" finden? - außer den beiden bereits mit Pfeilen markierten, natürlich!



Frank- und Shockley Versetzungen

Die Graphik zeigt in der $\langle 110 \rangle$ Projektion des fcc Gitters einen intrinsischen Stapelfehler, berandet durch eine Shockley Partialversetzung (*linkes* Bild) oder eine Frank Partialversetzung (*rechtes* Bild).

- Auch wenn der Versetzungscharakter der Shockley - Partialversetzung nicht so offenkundig ist wie beim Frankschen Gegenstück, muß man nur immer die Volterra Definition bedenken, um den Versetzungscharakter zu sehen und auch den Burgersvektor ableiten zu können.



Schneiden wir entlang der $\{111\}$ Ebene, entspricht das einem Schnitt in der Stapelfolge **ABCABCABC...**, z.B. zwischen **A** und **B**. Wir können nun einen Stapelfehler inkl. berandende Versetzung auf **2** Weisen erzeugen:

- Wir können das Gitter um eine Ebenendicke aufweiten und eine Lage Atome einfügen (das wäre dann die **C** - Lage) oder eine Ebene herausnehmen. In jedem Fall müssen wir senkrecht zum Schnitt die Ebenen um $\mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$ senkrecht zur Schnittebenen bewegen und schaffen damit einen *Franksche Partialversetzung*.
- Wir können aber auch z. B. die **B** - Ebene durch eine Verschiebung in der Ebene in die **C** - Lage überführen. Dann muß kein Material eingefüllt oder entnommen werden. Die Verschiebung kann durch drei Vektoren erfolgen, die alle von der **B** - Position zu einer der drei benachbarten **C** - Positionen zeigen. Die Verschiebungsvektoren, die gleichzeitig wieder die Burgersvektoren der berandenden Partialversetzungen sind, haben alle den allg. Vektor $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$.

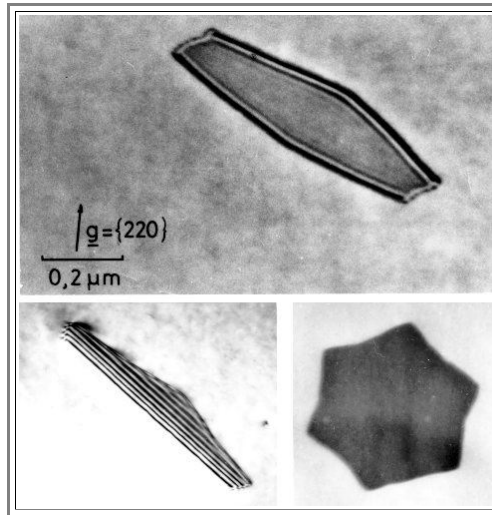
Falls Sie die Aufgabe 3-7 gemacht haben, wird Ihnen das alles bekannt vorkommen!

Defekte in Silizium und integrierten Schaltungen

Advanced

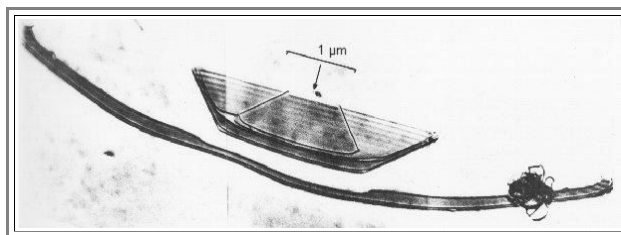
In Siliziumkristallen sind in thermischen Gleichgewicht wie bei allen Kristallen Leerstellen vorhanden, als Spezialität des Siliziums aber auch nennenswerte Konzentrationen an Eigenzwischengitteratomen.

- Beim Abkühlen agglomerieren diese **ZGA** zunächst zu kleinen Scheibchen - **extrinsischen Stapelfehlern** - die von einer **Frankischen Partialversetzung** berandet sind.
- Durch weitere Defektreaktionen können sich diese kleinen Stapelfehlerringe zu großen Versetzungsknäueln weiterentwickeln, die später, falls sie in den sensitiven Bereich einer integrierten Schaltung inkorporiert werden, für den Ausfall dieser Schaltung sorgen.
- Hier eine Kollektion simpler Stapelfehlerringe, die auf der $\{111\}$ -Ebene sechseckige Gestalt haben. Der Ring links unten ist durch die Oberfläche der (sehr dünnen) Probe teilweise abgeschnitten. Die Zebrastreifung ist typisch für die Abbildung von Stapelfehlern im Elektronenmikroskop.



Beim Oxidieren von Silizium - einer der häufigsten und wichtigsten Prozesse bei der Herstellung integrierter Schaltungen - werden **Si** Zwischengitteratome erzeugt.

- Wenn man Pech hat (d.h. den Prozeß nicht beherrscht) agglomerieren diese **ZGA** zu einem von der Oberfläche in die Tiefe wachsenden Stapelfehler. Diese "**oxidationsinduzierte Stapelfehler**" (abgekürzt **OSF** für "oxidation induced stacking faults") können sehr groß werden. Sie entstehen insbesondere dann, wenn eine vorher entstandene kleine Ausscheidung aus Verunreinigungsatomen (insbesondere **Fe**, **Cu**, **Ni** usw.) diesem **OSF** die Keimbildung erleichtert.
- Das Transmissionselektronenmikroskopbild zeigt ein ganzes System von extrinsischen Stapelfehlern, die alle von der kleinen Ausscheidung im Zentrum nukleiert wurden.



- Das schwarze Pünktchen am rechten Ende des Pfeils ist eine kleine Ausscheidung (wahrscheinlich **NiSi₂**), an der ein ganzes System von **OSF** nukleierte. Die Stapelfehler sind durch Frankische Partialversetzungen begrenzt, die als schwarze Linien sichtbar sind. Aus Interferenzgründen ist jeder **3.** Stapelfehler unsichtbar, alle anderen zeigen die charakteristische Zebrastreifung. Rechts unten hat sich durch eine Sekundärreaktion ein Versetzungsknäuel gebildet.
- Die vertikale Linie im linken Bildteil entstand durch aneinanderkleben zweier Photos, sie ist ein "**Artefakt**".

Geschichte des Stahls

The [newest version](#) of this module (including more prose and pictures) can be found in the Hyperscript "Defects"

Advanced

Um [Stahl](#) zu machen braucht es zunächst mal **Eisen**. Im Gegensatz zu den Edelmetallen (und gelegentlich auch mal **Cu**), kommt Eisen in der Natur nicht elementar vor, sondern immer als Verbindung, i.d.R. als Oxid.

- Aber im Gegensatz zu einigen anderen als Oxidverbindung vorliegenden Metallen, reicht die Temperatur eines besseren Feuers nicht aus, um Eisenoxid zu reduzieren *und* das entstandene Eisen zu verflüssigen - der Schmelzpunkt von **Fe** ist $T_m(\text{Fe}) = 1535\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- Deshalb hat niemand in den ersten **2000** Jahren (oder so) der Eisenzeit jemals Eisen oder Stahl *geschmolzen und gegossen* (das "**Gußeisen**" der alten Chinesen fällt nicht unter "Eisen und Stahl"!)- es wurde immer nur **geschmiedet**! Wagners **Siegfried**, wie auch die Typen in "**Conan der Barbar**", usw. usf., haben Schwerter nicht *gegossen*, sondern *geschmiedet*, d.h. aus kleinen festen Brocken mühsame "feuergeschweißt" und in die gewünschte Form geklopft. Und das war unvorstellbar **mühsam und kunstreich**!
- Bei **Cu** ist das anders ($T_m(\text{Cu}) = 1083\text{ }^{\circ}\text{C}$); bei einem heißen Feuer mit viel Holzkohle wird fast automatisch flüssiges **Cu** herauslaufen, wenn kupferhaltiges Gestein im Feuer liegt. Das ist wahrscheinlich schon vor gut **6000** Jahren geschehen und in seiner Bedeutung erkannt worden. Man kann spekulieren, daß die frühen Töpfer (die in ihren Brennöfen die nötige Temperatur von ca. **1200 °C** erreichten), vielleicht versucht haben, das als Schmuckstein bekannte grüne Mineral **Malachit** zum Verzieren der Töpfe zu verwenden. Was für eine Überraschung, als sie statt schöner Töpfe in der Asche das sehr wertvolle **Cu** vorfanden, das man bisher nur in kleinen Mengen aus Funden im Gebirge oder in Flußbetten kannte.

Entscheidend ist, daß die Menschheit schon früh erkannte, daß Materialien ineinander umwandelbar waren; aus unscheinbaren Steinen konnten schimmernde Metalle gewonnen werden! Die **Alchemie** hat hier ihre Wurzeln.

- Die frühe Metallindustrie begann; das nächste großtechnische Produkt war die **Bronze** (**Cu + (5 - 10) % Sn** und oft etwas **As**). Hier stoßen wir schon auf die Bedeutung der "Verunreinigung": Ein bißchen **As** als Fremdatom macht Bronze "fester"; sie verformt sich nicht mehr so leicht.
- Außerdem begann eine Umweltkatastrophe, denn für die Verhüttung von Metallen braucht man große Mengen Kohle - einmal um hohe Temperaturen zu erreichen, aber auch als Reduktionsagent nach der Grundgleichung $\text{MeO} + \text{C} \Rightarrow \text{Me} + \text{CO}$. Zur Verfügung stand ausschließlich **Holzkohle** - man brauchte ca. **100 kg** davon um **5 kg Cu** zu produzieren.
- Hier liegt - neben dem Schiffsbau - einer der Gründe für die weitestgehend verschwundenen Wälder in Europa (insbesondere in England) und der unzähligen Geschichten um die "**Köhler**" als Berufsstand.
- Andere Metalle, die schon in der Frühzeit mit beachtlichen Geschick aus Oxiden und anderen Verbindungen produziert wurden, waren die Edelmetalle, insbesondere **Ag**, sowie **Pb** und **Hg**. Besonders die Römer waren sehr geschickt in dieser frühen Metallurgie.

Aber das nützt alles gar nichts, wenn es um Eisen und Stahl geht. Die Alten kannten Eisen durchaus - als extrem seltenes und wertvolles Metall, das gelegentlich (als Meteorit) vom Himmel fiel. (Eskimos in Grönland haben für hunderte von Jahren ihre Schneidwerkzeuge aus einem **30 to** Meteor geschmiedet!). Im alten Sumer hieß Eisen "Himmelmetall" und bei den Pharaonen "schwarzes Kupfer vom Himmel".

- Man kann also annehmen, daß die alten Materialwissenschaftler nichts unversucht ließen, auch **Fe** aus geeigneten Steinen zu *erschmelzen*. Leider wollte das nicht so recht klappen - dafür braucht man nämlich eine Temperatur von **1535 °C**, und das ist nicht so ganz einfach zu erreichen. Zwar wußte man schon, daß kräftiges Blasen ins Feuer die Temperatur erhöht, aber dafür stand nur Lungenkraft zur Verfügung. Im [Link](#) ist ein ca. **4500** Jahre altes Relief aus einer Mastaba, dem altägyptischen Grab der Pharaonen und Würdenträger gezeigt, in dem Goldschmiede dargestellt sind, die zu viert durch Bambusrohre ins Feuer blasen.
- Bei den in der Antike max. verfügbaren **1200 °C** wird nun Eisenoxid zwar reduziert, aber das Fe wird dabei nicht flüssig. Kleine **Fe** - Partikel entstanden durch Festkörperreaktionen und waren eingeschlossen in die "**Eisenblüte**", eine Mixtur aus unreaktiertem Eisenoxid, Schlacke und unverbrannter Holzkohle, die man dann im Feuer fand.

Die frühen Schmiede konnte aber dieses recht reine und weiche Eisen durch Hämmern bei hohen Temperaturen und allerlei Tricks (inkl. der [Magie](#) und Anrufung der Götter) extrahieren und zu "**Schmiedeeisen**" kompaktieren.

- Große Sorgfalt war nötig. Wenn man nicht aufpaßte, oxidierte das **Fe** wieder; nahm es zuviel Kohlenstoff auf (**3% - 4%**), erhielt man **Gußeisen** mit einem Schmelzpunkt um **1130 °C**, das also flüssig und damit leicht bearbeitbar, aber auch sehr spröde und relativ nutzlos war.
- Trotzdem konnten die frühen Schmiede - vom griechischen Gott [Hephaistos](#) (dem römischen Vulkan) über den wagnerischen [Mime](#) bis zum germanischen [Wieland dem Schmied](#) - aus ihrem mühsam gewonnenen Schmiedeeisen Gerätschaften bauen (insbesondere natürlich Schwerter), die einfach viel besser waren als die handelsüblichen Bronzeartikel.

Was war das Geheimnis? Zunächst ist es sehr einfach: Der richtige Gehalt des interstitiellen Fremdatoms **C** im **bcc**-Gitter des Eisens bei Raumtemperatur ist wichtig. Erhöhte man (ohne natürlich zu wissen was man tat) den kleinen **C**-Gehalt von **ca. 0,1 %** des Schmiedeeisens auf optimale **0,9%**, stieg die Festigkeit aufs dreifache! War allerdings zuviel **C** im **Fe** - z.B. **2%** - war man schon auf dem Weg zum spröden und für Schwerter unbrauchbaren Gußeisen.

Da man **Fe** aber nicht schmelzen konnte, war der übliche (empirische) Weg des Zufügens von "magischen" Substanzen zur Schmelze versperrt. Der einzige Weg war, Kohlenstoff (und/oder, mit ebenfalls guter Wirkung, Stickstoff) über die Oberfläche einzudiffundieren. Das Rezept dazu war, das **Fe** (d.h. meist gleich das ganze Schwert) lange bei hoher Temperatur in einem Holzkohlenfeuer zu rösten, zu "tempern". Die alten Schmiede hatten dabei keine Ahnung was wirklich passierte; sie dachten, daß sie das Eisen im heiligen Feuer "reinigten". Diese Fehlmeinung geht, wie so viele andere, auf den aus Sicht der Materialwissenschaft etwas fragwürdigen Philosophen **Aristoteles** zurück.

Der erste Schritt zum Stahl ist damit getan: Es geht darum, den richtigen Kohlenstoffgehalt einzustellen.

Aber das Ganze ist noch viel komplizierter (und in einem [eigenen Modul](#) etwa detaillierter abgehandelt). **Fe** (mit ganz wenig Kohlenstoff) wandelt sich bei hoher Temperatur (genau bei **723 °C**) vom **bcc**-Gitter in ein **fcc**-Gitter um. Die **bcc**-Phase heißt allgemein **Ferrit** oder ferritisches Eisen, die **fcc**-Phase **Austenit** oder austenitisches Eisen.

Kohlenstoff fühlt sich nun im Austenit viel wohler als im Ferrit, d.h. bei hoher Temperatur kann sich relativ viel Kohlenstoff im (austenitischen) **Fe** lösen. Hat der Schmied lange genug geglüht oder kohlenstoffreiches Ausgangsmaterial genommen, hat er möglicherweise einen relativ kohlenstoffreichen Austenit, zumindest in den oberflächennahen Bereichen des Schwerts - die Frage ist, was jetzt beim Abkühlen passiert.

Kühlt das **Fe** ganz langsam ab, wird sich der **bcc**-Austenit hauptsächlich in den **fcc**-Ferrit umwandeln. Ist aber relativ viel **C** im Austenit, passiert etwas anderes, es bildet sich zwar auch Ferrit, aber mit weniger Kohlenstoff als im (heißen) Austenit und gleichzeitig eine neue Phase, eine **Fe - C** Verbindung mit dem Namen **Zementit** und einem komplizierten Gitter. In einem Schliffbild sieht man die beiden Phasen wie eine Schichtung von Platten nebeneinander liegen, das ganze Gebilde heißt **Perlit** (weil es im Mikroskop ähnlich wie Perlen gänzt).

Perlit, die Mixtur aus Ferrit und Zementit ist aber kaum besser als Bronze - nicht ohne weiteres zu gebrauchen. Die Phasenumwandlung vom Austenit zum Perlit muß verhindert werden, wenn man harten Stahl haben will. Die Kohlenstoffatome dürfen nicht genug Zeit bekommen, um durch sich durch Diffusion in einem Gebiet anreichern zu können, aus dem dann Zementit werden kann. Also muß **schnell** abgekühlt werden.

Hier kommt - nach der Gewinnung des Schmiedeeisens aus der Eisenblume und dem Glühprozeß zur "Aufkohlung", der nächste große Zauber der Schmiede zum Tragen: Das Abkühlen! Das heiße Schwert wird für einige Zeit in eine Flüssigkeit gesteckt (nur einfallslose Schmiede nahmen einfach Wasser) und dadurch "**abgeschreckt**", d.h. schnell abgekühlt.

Den Kohlenstoffatomen bleibt keine Zeit zur Umorganisation - es kann sich nur ein Ferrit bilden, das relativ viel Kohlenstoff enthält und das dadurch eine stark gestörte Gitterstruktur aufweist; eine Art Mischung aus **fcc**- und **bcc**-Gitter mit dem Namen **Martensit** und mit einer ca. fünffachen "Stärke" im Vergleich zum Schmiedeeisen.

Vor allem die japanischen Schmiede haben diese Technik bis zur Perfektion entwickelt; nachzulesen [im Link](#).

Dummerweise war dieses Martensit, so man es überhaupt erhielt, ziemlich spröde. Die Eigenschaften wurden aber - mit Glück und vielleicht den richtigen [magischen Prozeduren und Sprüchen](#) - viel besser, wenn man das Schwert jetzt nochmals heiß machte (allerdings nicht so heiß wie beim Aufkohlungsprozeß), ein bißchen darauf herumhämmerte usw.. Dabei manipulierte man ein **zweite** Defektsorte, die Versetzungen (siehe [Kapitel 4](#)); auf die wir aber in diesem Zusammenhang nicht näher eingehen wollen. Wenn alles klappte, hatte man ein (selbstverständlich dann magisches) Schwert aus Stahl!

Auch ein Professor lernt manchmal noch was dazu, und der nächste **blaue** Abschnitt sollte mit Vorsicht gelesen werden; er wurde geschrieben bevor ich mich mit der Geschichte des Schwertschmiedens etwas intensiver befaßte. In der vorliegenden Version basiert er auf den [Büchern](#) von [Steve Sass](#) und [Rolf Hummel](#).

Was folgt ist nicht etwa falsch, aber auch nicht die volle Wahrheit. Insbesondere die zum das Stichwort "**Damaszenertechnik**" gemachte Bemerkungen geben die Komplexität dieser Technik (und die vielen Mißverständnisse dazu) in keinsten Weise wieder.

In den folgende Links gibt es eine Vielzahl an Informationen (meist in Englisch), die die Kunst der antiken und mittelalterlichen Schmiede in einem noch viel hellerem Licht erscheinen lassen.

[Damascene Technique in Metal Working](#): Hier ist gezeigt, wie bei Merowingern, Wikingers, Kelten, Alemannen usw. ein besseres Schwert geschmiedet wurde, und warum es mit Recht fast "magisch" genannt werden kann.

[Literature to Damascene \(and Other\) Techniques in the Production of Iron and Steel From the Internet](#)

[A Cross-Linked Glossary of Some Terms from the History of Metal Working](#)

[Magische Schwerter](#)

- Wenn man bedenkt, was alles schiefgehen konnte (und hier ist bei weitem nicht alles aufgezählt, was auf die Qualität eines Schwertes noch Einfluß nehmen kann), ist es überaus erstaunlich, daß die alten Schmiede überhaupt Stahlschwerter zustande brachten. Außerdem war nicht unbedingt das ganze Schwert aus Stahl, sondern nur die äußere Schicht; soweit der Kohlenstoff eben eindiffundieren konnte.
- Erfindungsreiche Schmiede nahmen deshalb dünne Folien, die erstmal alle einzeln behandelt wurden, um dann - bei mindesten **800 °C** - zusammengeschiedet zu werden. Dazu mußten erstmal die Werkzeuge - besonders wichtig waren Eisenzangen - entwickelt werden. Diese Technik hatte ihre Blüte in **Toledo**, von wo aus vor allem die römische Truppen versorgt wurden.
 - Eine fünffach größer Festigkeit scheint nicht so besonders viel zu sein, aber die Konsequenzen waren schon beachtlich. Die alten Gallier wurden auch deshalb von den Römern unterworfen (außer dem bekannten kleinen Dorf natürlich), weil nach zeitgenössischen Berichten die alten Gallier ihre Schwerter nach jedem besseren Schlag erstmal überm Knie wieder geradebiegen mußten, während die römischen Schwerter "so stark waren, daß es keinen Helm gibt, der nicht von ihnen zerschlagen werden kann".
 - Eine andere Hochburg der Stahlherstellung war Damaskus mit den berühmten **Damaszener Klingen**. Diese beruhten auf einem aus Indien eingeführten Rohstahl (genannt "**Wootz**") mit sehr hohem Kohlenstoffanteil (**1,5 % - 2 %**) bestehend aus einer Mixtur aus **Zementit** und **Perlit**. Der Herstellungsprozeß einer Damaszener Klinge; ebenfalls eine **zusammengehämmerte** (*stimmt nicht!!*) Mixtur aus diesem tendenziell sprödem Material und weichem Schmiedeeisen, war schwierig und nicht ohne Besonderheiten. Wir sehen hier auch, daß das Wort "Stahl" ein Sammelbegriff ist, der viele verschiedene eisenbasierte Legierungen und Gefüge umschreibt.
- Aber nicht nur im Mittelmeerraum wurde die Eisen und Stahl Technologie entwickelt. Besonders weit entwickelte Technologien hatten zum Beispiel die Chinesen, die viele der großen Entdeckungen des 19. Jahrhunderts vorwegnahmen (aber nicht sehr viel damit machten) und die Inder.
- Letztere konnte das Geheimnis ihres "**Wootz**" **Stahls**, von dem die ganzen Meisterschmiede des Mittelmeerraumes abhingen, für viel hundert Jahre, wenn nicht gar **1000** Jahre geheimhalten (Man mische kleine Stücke von Schmiedeeisen mit Holzstücken und gewissen Blättern und heize das ganze in einem Tontopf mit Tondeckel in einem sehr heißen Feuer (unter diversen magischen Sprüche, versteht sich). Damit bekommt man vollständig mit Kohlenstoff durchsetzte Eisenstückchen, die man anschließend wieder durch Hämmern bei hoher Temperatur zusammenschmiedet).
- Nicht vergessen sollte man auch die **Haya**, ein Volk das im heutigen Tansania lebte und ebenfalls die Eisentechnologie bis zu einem gewissen Grad beherrschte. Ihr Mythen und Märchen enthielten viel Geschichten um das Eisenmachen, in einem Vokabular das stark angereichert war mit Ausdrücken die sich aufs Menschenmachen bezogen.
- Im Laufe der Jahrtausende wurde Eisen und Stahl trotz der vielen Schwierigkeiten allmählich übliche Materialien, auch der Schmelzpunkt von **Fe** wurde bald erreicht, aber die Massenproduktion von Stahl mußte noch bis zum **19.** Jahrhundert warten. Mit der ganzen Kunst der Schmiede konnten nach wie vor nur "dünne" Objekte wie Schwerter und Dolche, in die man genügend Kohlenstoff hineinbrachte, hergestellt werden .
- Auch die Holzkohle wurde ab dem **17.** Jahrhundert allmählich durch Kohle ersetzt, aber auch das war nicht ohne unangenehme Überraschungen. Eisen, das mit Steinkohle statt Holzkohle erschmolzen wurde, war ungeheure spröde und zu nichts nütze. Wie wir heute wissen, reichen geringste Mengen Schwefel Atome im **Fe** - Gitter (sie setzen sich in die Korngrenzen) um das Metall völlig zu verspröden, und Schwefel, wie auch andere Verunreinigungen, ist in Steinkohle reichlich enthalten.
- Die Lösung dieses Problem kam ausnahmsweise nicht vom Militär, sondern vom **Bier**. Auch die Bierbrauer hatten versucht, Kohle statt Holz als Heizmaterial zu verwenden um das Malz zu dörren, und erhielten ein stinkiges übel-schmeckendes Gesöff. So wurde Koks erfunden: man röste die Kohle unter Sauerstoffausschluß; das treibt die stinkigen Teile aus; was bleibt ist reiner sauberer Kohlenstoff - eben Koks - der nicht nur fürs Bierbrauen sondern auch für die Eisenverhüttung brauchbar war.
- Mit Beginn der industriellen Revolution wurde ein fehlender großtechnischer Prozeß zur Herstellung großer Volumina von Stahl zur Fortschrittsbremse. Die paradigmatische **Eisenbahn** braucht Gleise; mit normalem Schmiede- oder Gußeisen mußte man die Schienen alle drei bis **6** Monate auswechseln weil sie sich unter der Beanspruchung verformten. Unfälle waren häufig und oft katastrophal.
- Zwar hatte man längst gelernt, große Mengen von Eisen zu schmelzen - mit massiver Zufuhr von Luft durch Blasebälge, die auch durch Dampfmaschinen angetrieben wurden. **1850** lag allein die (führende) englische Produktion an Eisen bei immerhin **2,5** Millionen Tonnen im Jahr, aber Stahl war immer noch nur in relativ kleinen Mengen (im % Bereich des Eisens), mit wechselnder Qualität und mit hohen Kosten erhältlich.
 - Immerhin wußte man seit **1786**, daß Stahl etwas mit dem Kohlenstoffgehalt des Eisens zu tun hatte (die ersten, die diesen Verdacht äußerten, waren die Herren **Vandemonte**, **Berthollet** und **Monge** aus Frankreich).
 - Aber alle Versuche, Eisen gleich mit dem richtigen Kohlenstoffgehalt (und, wie wir wissen, dem richtigen Gefüge) herzustellen, waren vergeblich. Mal klappte es, mal klappte es nicht; einen verlässlichen großtechnischen Prozeß gab es nicht. Und damit auch keine großen Brücken, Wolkenkratzer, Autos, "richtige" Eisenbahnen, effiziente Antriebsmaschinen und Energieumwandler - man macht sich selten klar, wie stark Stahl die Welt verändert hat!

Wie so oft, war es die Rüstungsindustrie, die den Durchbruch brachte. Es war zunehmend lästig, daß die Kanonen oft selbst explodierten, es mußte etwas getan werden.

- Henry **Bessemer**, der auf der Suche nach besseren Kanonen war (er hatte gerade den Drall für Munition in Granatenform erfunden; nur leider hielten die gußeisernen Kanonen dem zusätzlichen Druck nicht stand), hatte auf der Suche nach besseren Kanonen und damit nach großen Mengen billigen Stahls **1855** als erster (so glaubte man) die Idee, durch das geschmolzene kohlenstoffreiche Roheisen Luft, oder noch besser, Sauerstoff in großen Mengen durchzublasen (was, nebenbei bemerkt, ohne Dampfmaschinen nicht möglich wäre). Damit bildet sich **CO**, das abbrennt und nebenbei die Temperatur hochhält. Wenn man rechtzeitig aufhört, kann man den Kohlenstoffgehalt von großen Mengen Eisen jetzt in einem schnellen Prozeß auf den richtigen Wert einstellen und erstmals große Volumenmengen an Stahl produzieren.
- Der Trick war also, nicht wie bisher kohlenstoffarmem Schmiedeeisen mühsam etwas Kohlenstoff einzudiffundieren, sondern aus kohlenstoffreichem Gußeisen den Kohlenstoff bis auf einen nützlichen und genau definierten Rest zu entfernen (wann der richtige Zeitpunkt gekommen war, sah der Experte an der Farbe der Flammen die aus der Bessemerbirne Herausschossen).
- Herr Bessemer, der auch schon als Erfinder des "**Blei**"stiftes (der in Wahrheit Graphit enthält) kein Unbekannter war, wurde über Nacht berühmt, und innerhalb eines Monats schwer reich - alle wollten sein Rezept übernehmen. Aber so leicht sind atomare Fehlstellen dann doch nicht zu überlisten. Die großtechnische Umsetzung des "**Bessemerprozesses**" führte zu einer der großen Überraschungen ("**Denn sie wissen nicht, was sie tun**") in der Produktion: Der Bessemer Stahl aus der Großproduktion war, im Gegensatz zu den Ergebnissen der "Laborversuche", spröde und zu nichts zu gebrauchen. Für Bessemer war es "wie ein Blitzschlag aus heiterem Himmel"; der Absturz vom Erfinderolymp in die Verzweiflung war jäh und hart.
- Aber Bessemer war ein guter Materialwissenschaftler; er biß die Zähne zusammen, arbeitete Tag und Nacht und gewann. Was war passiert?

Bessemer hatte für seine Versuche **schwedisches** Eisenerz verwendet; seine Landsleute verwendeten einheimisches - und **englisches** Eisenerz enthielt **Phosphor**. Phosphor wird im Bessemerprozeß so wie er gemacht wurde nicht beseitigt; wiederum reichen kleine Menge dieser atomaren Fehlstelle, um **Fe** oder Stahl spröde zu machen. Wie wir heute wissen, setzen sich die **P** - Atom gerne in die Korngrenzen des Stahls und verändern dort die lokalen Eigenschaften ins Negative.

- Der Phosphor mußte raus - aber wie? Es waren die Vettern Sydney Gilchrist **Thomas** und Percy Carlyle **Gilchrist**, die den Weg wiesen: man nehme (auch) Kalkstein zur Ausmauerung der "Bessemerbirne" und gebe ein bißchen auch direkt in die Schmelze, und der Phosphor bleibt in der Schlacke oder der Ummantelung.
- Bessemer's Auskleidung seiner "Bessemerbirne" nutze "saure" Silikate; das funktioniert dann nicht. Natürlich wäre auch niemand auf die Idee gekommen, dass eine simple Sache wie die keramische Auskleidung eines überdimensionierten "Kochtopfs" sozusagen über Leben und Tod entscheidet.
- Ein anderes Problem mit dem Bessemerprozeß war, daß gelegentlich Sauerstoff zurückblieb und im Stahl Gasblasen formte, die das Produkt wiederum unbrauchbar machten. Ein Herr **Mushet**, ein anderer Engländer, hatte dafür die rettende Idee: Man füge der Schmelze etwas Spiegeleisen zu - ein Konglomerat das **Fe**, **Mn** und **C** enthielt - und man bekommt besten Stahl, denn das **Mn** reagiert mit dem Überschußsauerstoff zu Manganoxiden, die in der Schlacke verbleiben. Außerdem neutralisiert es den sehr schädlichen Schwefel.
- Wie so oft, ging aber sein Beitrag aber in der Aufbruchsstimmung des **19.** Jahrhunderts unter; der Name Bessemer wird wohl weiterhin mit der großindustriellen Herstellung von Stahl assoziiert bleiben. Auch Herr **Kelly** aus den **USA**, der eigentlich knapp **10** Jahre vor Bessemer das "Bessemer" Verfahren entdeckte, wurde in den Patentstreitigkeiten zwar mit Geld fürstlich abgespeist, ist aber als Materialwissenschaftler vergessen.
- Nach Bessemer ging es Schlag auf Schlag: **Siemens** in Deutschland und **Martin** in Frankreich entwickelten das "Siemens-Martin-Verfahren usw., die Weltproduktion an Stahl schnellte exponentiell in die Höhe: **22 kto** in **1867**, **1 Mto** in **1880** und **9 Mto** in **1900** und **>500 Mto** heute. Noch in den **70er** Jahren unseres Jahrhunderts wurde allgemein unterstellt, daß die Wirtschaftsmacht, und damit auch die politische Macht eines Landes, sich praktisch nur aus seiner Stahlproduktion/ und damit nach dem Grad der Beherrschung von atomaren Fehlstellen in **Fe**, bestimmt.

Man könnte jetzt das Gefühl haben, dies sei eigentlich Chemie und es ginge um das Uranliegen der Chemie, besonders reine Stoffe herzustellen. Das ist zwar nicht gänzlich falsch; aber in Wirklichkeit geht es ausschließlich um den Einfluß **atomarer Fehlstellen** auf die Bildung verschiedener Phasen und auf die Erzeugungen und Bewegung anderer Defekt im Eisenkristall, den Versetzungen. Mit Chemie hat das nichts zu tun.

Wer es genauer wissen möchte, vielleicht auch mehr über die Bedeutung der Metalle für die Entwicklungen im Mittelmeerraum wissen möchte, liest nach, insbesondere bei [S. Sass, I. Amato und R. Hummel](#)

■ Hier noch einige andere Module zum allgemeinen Thema im Zusammenhang:

- [Stahl aus materialwissenschaftlicher Sicht](#)
- [Magische Schwerter](#) (und japanische Schwerter)
- [Gruselige Schmiedegeschichten](#) (mit Magie).
- [Der Ring des Nibelungen](#) Zur Schmiedekunst und Siegfrieds Schwert
- [Details zur Damaszener Technik](#) (Englisch); viele weiterführende Links.
- [Ein "magisches" Schwert](#) (Englisch). Originalbild und Nachbau.

Und sie wissen nicht was sie tun: Atomare Fehlstellen und unerwartete Dramen in der Produktion

Hier soll nur ein Eindruck vermittelt werden, wie dramatisch sich selbst kleine Änderungen in der Konzentration, Art oder Verteilung von **AF** (in der Regel extrinsische **AF**) in einer Fabrik auswirken können. Die Liste ist bei weitem nicht vollständig.

Advanced

Der Anlauf der *großtechnische Produktion von Stahl*.

- Henry **Bessemer**, der auf der Suche nach besseren Kanonen war (er hatte gerade den Drall für Munition in Granatenform erfunden; nur leider hielten die gußeisernen Kanonen dem zusätzlichen Druck nicht stand), hatte auf dieser Suche - und damit nach großen Mengen *billigen* Stahls **1855** als erster (so glaubte man) die Idee, durch das geschmolzene kohlenstoffreiche Roheisen Luft, oder noch besser, Sauerstoff in großen Mengen durchzublasen (was, nebenbei bemerkt, ohne Dampfmaschinen nicht möglich wäre). Damit bildet sich **CO**, das abbrennt und nebenbei die Temperatur hochhält. Wenn man rechtzeitig aufhört, kann man den Kohlenstoffgehalt von großen Mengen Eisen jetzt in einem schnellen Prozeß auf den richtigen Wert einstellen und erstmals große Volumenmengen an Stahl produzieren.
- Der Trick war also, nicht wie bisher *kohlenstoffarmem* Schmiedeeisen mühsam etwas Kohlenstoff einzudiffundieren, sondern aus *kohlenstoffreichem* Gußeisen den Kohlenstoff bis auf einen nützlichen und genau definierten Rest zu entfernen.
- Herr Bessemer, der auch schon als Erfinder des "Blei"stiftes (der in Wahrheit Graphit enthält) kein Unbekannter war, wurde über Nacht berühmt, und innerhalb eines Monats schwer reich - alle wollten sein Rezept übernehmen. Aber so leicht sind atomare Fehlstellen dann doch nicht zu überlisten.
- Der Bessemer Stahl aus der Großproduktion war, im Gegensatz zu den Ergebnissen der "Laborversuche", spröde und zu nichts zu gebrauchen. Für Bessemer war es "wie ein Blitzschlag aus heiterem Himmel"; der Absturz vom Erfinderolymp in die Verzweiflung war jäh und hart.
- Aber Bessemer war ein guter Materialwissenschaftler; er biß die Zähne zusammen, arbeitete Tag und Nacht - und gewann! Was war passiert? Bessemer hatte für seine Versuche schwedisches Eisenerz verwendet; seine Landsleute verwendeten einheimisches - und englisches Eisenerz enthielt Phosphor. Phosphor wird im Bessemerprozeß nicht beseitigt; wiederum reichen kleine Menge dieser atomaren Fehlstelle, um **Fe** oder Stahl spröde zu machen. Wie wir heute wissen, setzen sich die **P** - Atom gerne in die Korngrenzen des Stahls und verändern dort die lokalen Eigenschaften ins Negative. Der Phosphor mußte raus - aber wie.
- Es waren die Vettern Sydney Gilchrist **Thomas** und Percy Carlyle **Gilchrist**, die den Weg wiesen: Man nehme (auch) *Kalkstein* zur Ausmauerung der "**Bessemerbirne**" und gebe ein bißchen auch direkt in die Schmelze, und der Phosphor bleibt in der Schlacke oder der Ummantelung.
- Ein anderes Problem mit dem Bessemerprozeß war, daß gelegentlich Sauerstoff zurückblieb und im Stahl Gasblasen formte, die das Produkt wiederum unbrauchbar machten. Ein Herr **Mushet**, ein anderer Engländer, hatte dafür die rettende Idee: Man füge der Schmelze etwas **Spiegeleisen** zu - ein Konglomerat das **Fe**, **Mn** und **C** enthielt - und man bekommt besten Stahl, denn das **Mn** reagiert mit dem Überschußsauerstoff zu Manganoxiden, die in der Schlacke verbleiben.
- Uns so weiter. Mehr dazu im Modul "[Stahl](#)".

Produktionseinbruch bei der *Herstellung integrierter Schaltungen*.

- Ende der **70er** Jahre, als integrierte Schaltungen explosionsartig den Markt eroberten (damals war das Leitprodukt der **16 kbit** Speicher), brach plötzlich weltweit die Produktion ein - die Ausbeuten an guten integrierten Schaltungen gingen fast überall in den Keller.
- Der Grund dafür (wie man nachträglich herausfand) war, daß der damalige Hauptlieferant von Silizium-Scheiben (die deutsche Fa. Wacker-Chemitronic), den Prozeß zur Herstellung der Silizium Kristalle etwas *geändert* hatte und die Kristalle jetzt ein wenig mehr Kohlenstoff als substitutionelles Fremdatom enthielten. Die Konzentration, die vorher bei ca. **1 ppm** lag, hatte sich auf ca. **2 ppm** erhöht - nicht eben viel.
- Das war aber ausreichend, um während der Herstellung der integrierten Schaltungen eine ganze Kette an Defektreaktionen zu starten, die aus atomaren Fehlstellen größere Kristalldefekte machten mit sehr schädlichen Auswirkungen auf die elektronischen Eigenschaften der Transistoren.
- (Aus der Halbleitertechnologie könnte man noch weitere Beispiele anführen, man lese das sehr empfehlenswerte Buch "[Kristallene Krisen](#)" von **Joachim Queisser**. oder konsultiere den [Link](#).

Produktionseinbruch bei der *Herstellung von Elektrolytkondensatoren*.

- Bei der Produktion von Elektrolytkondensatoren werden **Al**-Folien aus Reinstaluminium durch ein elektrochemisches Bad gezogen, dabei wird eine Unzahl kleinster Poren in die Folie geätzt um so die Oberfläche zu vergrößern.
- Diese Prozeß, der seit langem problemlos lief, funktionierte so um **1995** schlagartig nicht mehr. Wie sich herausstellte, hatte die Herstellerfirma der **Al**-Folien ihr Produkt *verbessert*, d.h. das **Al** etwas reiner gemacht (= den Gehalt an extrinsischen **AF** erniedrigt).
- Das war der (unverstandene) Grund. Erst jetzt erkannte man, daß der Porenätzprozeß eine bestimmte extrinsische Fehlstelle in einer Konzentration von mindestens **0,5 ppm** braucht, sonst funktioniert er nicht. Warum dies so ist weiß immer noch niemand - hier setzt die moderne Forschung ein.

Magische Schwerter

Was ist ein Schwert?

Advanced

Ein Schwert (oder Säbel, Degen, Scimitar, Tulwar, Shamshir, Yatagan, Katana, Wakizashi, ...) ist eine Waffe mit einem einzigen Verwendungszweck: Menschen gewalttätig umzubringen oder zu verletzen.

- Für ein Schwert gibt es sonst **keine** weitere direkte Verwendung. Jedermann sollte sich immer sehr klar darüber sein.
- Mann (gelegentlich auch Frau) kann und konnte reale Schwerter aber auch **indirekt** nutzen:
 - Als Rangabzeichen (Offiziere haben zum Teil heute noch ein Schwert).
 - Als Klassenausweis (Zeigt an wer satisfaktionsfähig ist, und wer nicht).
 - Als Statussymbol (Selbst als Offizier konnte man ein teures oder ein gewöhnliches Schwert mit sich herumtragen).
 - Als Staatssymbol ("Reichsschwert", wie auch Szepter, Krone, Reichsapfel, etc.) mit dessen Besitz auch Legitimität verbunden war. [2\).](#)
 - Als ein Art "historisches Kunstwerk" das frühere nationale Größe oder sowas symbolisiert (z.B. in Japan).
 - Als Geschenk (von König zu König, oder bis vor kurzem im Osten noch als eine Art Pokalersatz).
 - Als Werkzeug für den "Ritterschlag" (macht die Queen das noch?).

Schwerter sind aber mehr als nur Werkzeuge oder Symbole wie oben beschrieben. Sie sind insbesondere **auch**:

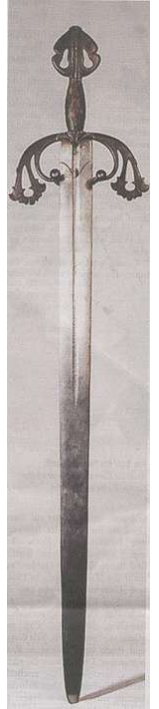
1. Ein Faszinosum für fast alle Männer im Altersbereich **2 - 80** Jahre. Überall auf der Welt. Warum? Wer weiß. Freud hätte sicher was in Richtung Phallussymbol gemurmelt; Ritter, Piraten, Musketiere oder Samurai sind in Büchern, Erzählungen und Filmen als Rollenmodelle für Jungs noch recht lebendig, mit der Verleihung eines Schwertes im Fest der "Schwertleite" wurde der Junge zum Mann, usw. - jeder und jede darf sich was raussuchen.

- Wie wahr das auch heute noch ist zeigte sich z.B. soeben an dem ungewöhnlichen Umstand dass sämtliche Jungs in der **8. Klasse** meiner Tochter sich **freiwillig** an einem englischen Theaterstück beteiligten (sehr ungewöhnlich!): Sie alle bekamen (Holz)schwerter und durften damit kämpfen!
- Jedes Burgmuseum hat in der Regel ein Schwert, das man anfassen darf, da die Männer einfach das Bedürfnis dazu haben (und man damit der Gefahr vorbeugt, dass sie heimlich mit einem Ausstellungsstück Unfug machen).

2. Ein Ausdruck der metallurgischen Spitzentechnik des jeweiligen Zeitalters einer Kultur.

- Das ist wohl jedem (und jeder) klar: Selbstverständlich hat man für Gebrauchsschwerter die beste Technik verwendet, die es gab - hier ging es direkt um Leben oder Tod; nur das Beste war gut genug.
- Nicht so klar ist aber den meisten, dass die Herstellung eines Schwertes aus Eisen oder Stahl für über **2000** Jahre ungeheuerlich kompliziert war (um Größenordnungen aufwendiger als ein Bronzeschwert), und sehr häufig daneben ging.
- Das liegt daran, dass die frühen Metallurgen (= Schmiede) nicht den Schimmer einer Ahnung hatten (und auch nicht haben konnten), was im System Eisen - Kohlenstoff (plus diverse Verunreinigungen) so alles möglich ist. Auch **Aristoteles** hat es (wie immer) exakt falsch herum erklärt, indem er Stahl als besonders reines Eisen deklarierte [5\).](#) Selbst heute tut sich der typische Student der Materialwissenschaft noch immer recht schwer, auch nur die Grundzüge des [Eisen-Kohlenstoff Phasendiagramms](#) zu verstehen. Der Link führt im übrigen auf den wissenschaftlichen Teil zum Thema.

Im folgenden wollen wir uns **nur** mit dieser zweiten Bedeutung der Schwerter beschäftigen:



Die "[Tizona](#)"
[1\)](#)
Das
Schwert des
El Cid

Wir betrachten das Schwert als
Paradigma
für die Metallurgie alter Kulturen

Was ist ein "magisches" Schwert?

- Die alten Schmiede haben - durch "[trial and error](#)" - mit den ihnen zur Verfügung stehenden Materialien und Techniken nahezu Übermenschliches geleistet: Das **perfekte** Schwert.

 - Wir könnten es heute auch nicht besser machen - mit den damals verfügbaren Materialien. Genauer gesagt, gibt es heutzutage nur sehr wenige Schmiede, die es überhaupt noch könnten. In Japan gehören sie dann zu den sogenannten "living national treasures" [6](#).
 - Natürlich haben wir heute bessere Stähle und Techniken; und ein heutiges "optimiertes" Schwert wäre den alten japanischen, keltischen oder spanischen Klingen sicher überlegen - aber nicht viel.
- Man muß sich jetzt mal kurz fragen, was denn ein Schwert "perfekt" macht. Man kommt schnell auf eine ganze Latte von wünschenswerten Eigenschaften:

 - Zunächst ist wichtig, dass es beim Kampf unter keinen Umständen **bricht**, oder sich auch nur nennenswert verbiegt. Es gibt wenig peinlicheres (im Wortsinn) als plötzlich nur noch mit dem Heft in der Hand dazustehen!
 - Ein richtig dickes schweres Schwert würde zwar nicht brechen, aber auch nichts nützen; wir haben natürlich noch die Forderung nach **optimalem Gewicht**. Nicht zu schwer, damit man es überhaupt schwingen kann, aber auch nicht zu leicht, damit auch genügend Wucht hinter einem Schlag steckt.
 - Diese beiden Bedingungen legen für ein **gegebenes** Material sofort die nutzbare **Länge** fest. Deswegen sind Bronzeschwerter immer relativ kurz - würde man sie länger machen wären sie zu schwer oder nicht mehr stabil. Die Degen der Musketiere aus bestem Stahl sind dafür besonders lang.
 - Das Schwert muß sehr **hart** sein - zumindest die Schneide, damit man "durchkommt" - durch das Schwert des Gegners, seine Rüstung, seine Knochen. Wie wichtig das ist sieht man beispielsweise daran, dass die beiden ersten Forderungen auch durch ein Holzsword befriedigt werden könnten (die es im übrigen auch gab, z.B. auf Hawaii).
 - Außerdem sollte es **scharf** sein, und die Schärfe auch halten können. Zwar gab es Schwerttypen (die "Breitschwerter") bei denen Schärfe nicht primär wichtig war (es waren hauptsächlich knochenbrechende Schlaginstrumente), aber Schärfe hat auch dann noch zusätzlichen "Grenznutzen" gebracht und sicher nicht geschadet. Haltbare Schärfe setzt jedoch Härte voraus (man versuche mal ein Goldsword zu schärfen **und** scharf zu halten); Härte und Schärfe gehen also zusammen.
- Hart** ist aber so ziemlich dasselbe wie **spröde**. Damit haben wir ein Problem, das **Zentralproblem** der Schwertschmiede:

 - Das Schwert soll extrem hart sein, aber gleichzeitig **duktil** (= das Gegenteil von spröde). Sich allenfalls **elastisch** etwas biegen, jedoch nicht **verbiegen**, und keinesfalls brechen. Erlaubt ist allenfalls eine lokale Scharte, d.h. eine lokale **plastische Verformung** wie sie bei duktilem Material möglich ist. Das ist zwar schlecht, aber allemal besser als ein glatter Bruch. Man muß sich nur mal ein Glas- oder Goldsword vorstellen um das Problem in voller Schärfe zu sehen.
- Die restlichen Anforderungen sind zwar auch wichtig, aber nicht mehr so schwierig:

 - Die **Form** soll dem Kampfstil optimal angepaßt sein (Schneiden, Schlagen oder Stechen, zu Fuß oder hoch vom Pferd). Gute **Balance** ist wichtig (= Schwerpunkt kurz nach dem Griffstück), es soll einfach zu pflegen sein (nicht stark rostend, nachschleifbar), und gut (oder furchterregend) aussehen.
- Wir können uns heute wahrscheinlich nur schwer vorstellen, welchen Eindruck zu Beginn der Eisenzeit ein gutes **Stahlsword** auf **Bronze**schwerträger machte, und was die Überlebenden dann für Wunderdinge darüber erzählten.

 - Wer sich so ein Supersword beschaffen konnten war gut dran! Im "finsternen" Mittelalter (ganz grob von **400 - 700**) aus dem die "magischen Schwerter" Sagen letztlich stammen, dürften das nur die Häuptlinge größerer Verbände, vulgo Könige, gewesen sein.
 - Nur sie kamen entweder in den Genuß der Spitzenprodukte ihrer eigenen Schmiede, konnten sich gute Schwerter von durchreisenden "Fremdlingen aus dem Morgenland" leisten, oder sie den "Mohren" (= Mauren) im Kampf abnehmen (siehe [1](#)). Oder sie bekamen sie schlicht von anderen Königen geschenkt [8](#).
- Selbstredend waren das dann besondere, oder eben **magische** Schwerter.

 - Schon der Schmied hat bei der Herstellung Magie benutzt, der Oberhierarch erhöht mit einem magischen Schwert aus göttlicher oder mysteriöser Herkunft sein Ansehen (außerdem kann er selbstredend nicht zugeben, dass es etwas gibt was sein Volk nicht hinkriegt), und die jeweilige theologische Schicht wird der Superwaffe, wie immer, auch ihren Segen gegeben haben.

- So ein magisches Schwert unterstreicht dann auch sehr schön den damals üblichen Anspruch der Regierenden. Einmal das "von Gottes Gnaden", dann auch das "Herr über Leben und Tod" ²⁾.

■ Aber auch wenn's nicht direkt magisch war: Seinem treuen Schwert gab ein besserer Held zumindest einen Namen. Die bekannteren waren

- **Notung**. Das ist **Wagner's** Schwert für **Sigmund** und seinen Sohn **Siegfried**; er hat das vom Nibelungenlied übernommen. **Wotan** persönlich hat es in eine Esche gestoßen; nur der "Richtige" kann's herausziehen. Wer's gemacht hat bleibt (bei Wagner) unklar, es kommt wohl aber nur **Donar**, der germanische **Hephaistos**, in Frage. Notung heißt "Aus der Not geboren"
- **Balmung**. In der **Nibelungen Saga** ist Balmung das Schwert, das Siegfried aus dem zerbrochenen **Notung** schmiedet. Es gibt dazu aber viele Versionen (wie auch vom Nibelungenlied und den verwandten Sagen).
- **Excalibur**. **König Arthur's** magisches Schwert; das er von einer Art Meerjungfrau (Lady of the lake) erhalten hat (für die es ein Elferschmied von Avalon gemacht hatte). Excalibur ist nicht zu verwechseln mit dem Schwert, das Jung-Arthur aus dem Stein zog. Das hatte König Uther Pendragon hineingestoßen und irgendwie war auch Magie (d.h. Merlin der Zauberer) im Spiel; es hatte aber keinen uns überlieferten Namen und ist dann auch im Kampf gebrochen. Der Name "Excalibur" hat auch eine Geschichte: In den frühesten König Arthur Sagen hieß sein Schwert **Caladfwlch**, ein "welscher" Name, der sich wiederum von **Calad-Bolg** ableitet, was "Harter Blitz" bedeutet. Später wurde daraus bei Geoffrey of Monmouth, dem Hauptautor der König Arthur Legende, "**Caliburn**". Das war dann die Wurzel des französischen **Excalibur** wie wir es heute kennen.
- **Tourendal**. **Roland's** Schwert aus der Roland Saga.
- **Mimung**, das Schwert, das **Wieland der Schmied** für seinen Sohn **Wittich** schmiedete (mit Hilfe der **Hühner**).
- **Eckesachs** and **Nagelring** waren die Schwerter **Dietrichs von Bern**.
- **Colada** und **Tizona** gehörten **El Cid**; die "Tizona" ¹⁾ ist oben dargestellt. Das Schwert ist, so weit man das wissen kann, wohl echt.
- **Curtana**, das Schwert **Tristans** (oder "Ogier des Dänenkönigs", so um **800**); jetzt eines der drei Zeremonieschwerter des britischen Königshauses; siehe das Bild rechts ("Variously reputed to be the sword of Edward the Confessor, Ogier the Dane, and Tristan"). Das vorhandene Schwert wurde allerdings für die Krönung von Charles II in **1661** gefertigt.



Die **Curtana** ²⁾ des britischen Kronschatzes. Curtana war der Name des Schwert von **Tristan** (der aus der Tafelrunde; nicht der von Wagner)

■ Je realer es wird, desto weniger Magie ist im Spiel; wie man es auch nicht anders erwarten würde.

- Leider sind so gut wie keine Schwerter aus der Antike und dem Frühmittelalter gut erhalten geblieben. Der Held bekam sein Schwert mit ins Grab; falls überhaupt was übrig blieb ist es stark verrostet; das im Link gezeigte **Merowingerschwert** aus **ca. 500 n.C.** ist noch vergleichsweise extrem gut erhalten.
- Wirklich gut erhaltene Schwerter gibt es in Europa erst so ab **1000 n.C.**; gelegentlich vielleicht noch von **800 n.C.** Die sind dann aber schon in einer vergleichsweise simplen Technik gefertigt und nicht mehr so "magisch" wie Excalibur oder Notung, die so um **400 - 700 n.C.** entstanden sein werden
- In dieser Epoche des "finsternen" Mittelalters waren übrigens die Schmiede hochgeschätzt; **vorher** (in der Antike) und **nachher** (Mittelalter bis heute) sah man in Ihnen nur rußige Gesellen, die allein schon deshalb minderwertig waren, weil sie, wie alle niedrigen Stände, **arbeiteten** - was **Edelleute** oder Gentlemen prinzipiell nicht tun. In den Wirren der Völkerwanderung, nach dem Zusammenbruch des römischen Reiches, mußten aber wohl auch Adelige arbeiten, und niemand fand etwas dabei wenn ein Königssohn (wie Siegfried) bei einem Schmied in die Lehre ging.

■ Ein lesenswerter Beitrag zur Thematik stammt von **Martin Marheinecke**; mit dem Link abrufbar

Wie macht man ein Schwert ?

Wie machte man im Altertum überhaupt ein Schwert - **magisch** oder normal?

- Nicht, wie die meisten glauben, indem man geschmolzenen "Stahl" in eine Form gießt. Gußstahl gibt es erst seit dem **19ten** Jahrhundert; in Deutschland darf man damit gerne den Namen "Krupp" und "hart wie Kruppstahl" assoziieren. Vorher wurde Stahl nie gegossen. (Sprödes **Gußeisen** mit hohem Kohlenstoffgehalt, das schon vor mehr als **2000** Jahren gegossen wurde, ist **kein** Stahl!).
- Auch wenn das von Wagner's Siegfried bis zu "Conan der Barbar" falsch dargestellt wird: Schwerter wurden, wie alle anderen Eisen/Stahlgegenstände auch, so gemacht, dass man kleine Stahlstücke zu großen zusammengeschmiedet hat, und aus den großen Brocken dann das Schwert hämmerte.

Bei Schwertern hat man dabei zu einem Trick gegriffen, der so ziemlich überall in der einen oder anderen Form auftaucht:

- Man hat Materialverbünde aus harten und weichen Stählen geschaffen, um den obigen Forderungen gerecht zu werden. Das Stichwort dazu ist "**Damaszenertechnik**".

Ironischerweise wurden die "echten" Damaszenerklingen in Form der **Szimitare**, der Krummsäbel der **Sarazenen**, die unsere Kreuzritter so beeindruckten, **nicht** mit dieser Technik hergestellt.

- Sie sind zwar, wenn man so will, zwar auch ein Verbundwerkstoff - feine **FeC₃** Partikel in einer "Eisen"matrix - der aber nicht durch Verbinden zweier verschiedener Ausgangsmaterialien entstanden ist, sondern indem man das zweite Material durch Ausscheiden aus dem homogenen kohlenstoffreichen Ausgangsmaterial darstellte.

Es lohnt sich vielleicht, jetzt in einige andere Module hineinzuschauen (man muß aber nicht; was folgt ist auch so noch halbwegs verständlich):

- Ein kleiner Schnellkurs zur Geschichte des Eisens und Stahls
 - [Auf Deutsch](#)
 - [Auf Englisch](#) (die im Zweifel aktuellere Version)
- Ein [großer Langkurs](#) (knapp 300 Bilder und entsprechend viel Text) auf Englisch.:
- [Gruselige Schmiedegeschichten](#) (mit Magie).
- [Der Ring des Nibelungen](#) Zur Schmiedekunst und Siegfrieds Schwert
- [Details zur Damaszenerntechnik](#) (Englisch); viele weiterführende Links.
- [Ein "magisches" Schwert](#) (Englisch). Originalbild und Nachbau.
- Und natürlich das ganze Kapitel **7** und **8**; insbesondere aber [Unterkapitel 8.4](#), das sich direkt mit Stahl beschäftigt.

Niemand weiß heutzutage ganz genau, wie die Schmiede der Antike und des frühen (= dunklen) Mittelalters Schwerter schmiedeten, und wieviel Ausschuß sie dabei produzierten.

- In Japan gibt es aber noch Schwertschmiede, die nach antikem Vorbild arbeiten. Extrapoliert man ihre Erfahrungen und sonstige Hinweise rückwärts in der Zeit, kommt man zu erstaunlichen Zahlen: Die Ausschußquote dürfte bei **50%** gelegen haben; bei Spitzenschmieden vielleicht nur bei **25%**.
- Big deal? Wieviele Schwerter macht denn so ein Schmied am Tag? Hier kommt die erste Überraschung: Falls er gut ist (d.h. **10** Jahre oder länger geübt hat), macht er **1 - 2** pro **Monat**!

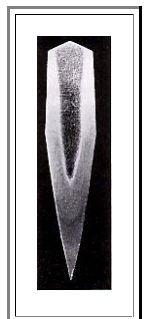
Niemand wußte, warum es mal gut, mal schlecht lief; wahrscheinlich kam es auch darauf an, dass die jeweils zuständigen Götter einem gerade gewogen waren und die Hierarchieebene darunter (Kobolde, Hausgeister, Hexen, Zauberer, ...) einem nicht in die Suppe bzw. Kühlflüssigkeit spuckten. Wie sonst sollte man erklären, dass es manchmal klappt, manchmal nicht - obwohl man immer exakt dasselbe tut?

- Man kann sicher sein, dass jeder Schmied "sein" Rezept immer exakt befolgte, eifersüchtig hütete, und alles tat, um den notwendigen göttlichen Beistand zu erhalten (wobei man immer bedenken sollte, dass es damals fast überall viele Götter gab, die sich nicht immer wohl gesonnen waren und einen armen Schmied ganz schön traktieren konnten).
- Ähnliches galt für die Besitzer. Ein gutes Stahlschwert war eine Kostbarkeit; sein Wert würde heutzutage einer Wohnung oder einem besseren Auto entsprechen. Man nahm es mit ins Grab oder vererbte es; jedenfalls betrachtete man es als besonderes Objekt.
- Wie schnell es dann "magisch" werden kann, läßt sich leicht nachvollziehen wenn man nur mal anschaut, was für Trivialzeugs für extrem viele Leute **heute noch** magische Kräfte hat, falls man "magisch" mit "wissenschaftlich nicht verstanden; unerklärbare Glaubenssache" übersetzt: Astrologie, Vollmond, Homöopathie, Amulette, Feng Shui, Kristalle, Aromatherapie, [Pyramiden](#), Gebetsmühlen, Weihwasser,)

Im folgenden schauen wir uns ganz kurz an, wie ein **japanisches Schwert** entstand; zum Schluß vergleichen wir die vorgestellte Technik mit den Damaszenerschwertern der Kelten und der Inder bzw. Araber.

- Auf Details, die anderswo besprochen sind, wird dabei nicht eingegangen; wohl aber werden die entsprechenden Links gesetzt.

- Zunächst brauchen wir **Stahl** - d.h. Eisen mit etwas Kohlenstoff; so zwischen **0,5 % - 1,5 %** Gewichtsprozent sollten es sein.
- Das ist nicht so wenig wie es erscheint, denn **6.7 Gewichts**prozent Kohlenstoff entsprechen **25 Atom**prozent - 1 **C** Atom auf **3 Fe** Atome.
 - Weiterhin hätten wir gerne möglichst **kein** Schwefel (**S**) oder einige andere Elemente, dafür aber vielleicht etwas **Ni, Co, V, Si** und **Mn**. Phosphor (**P**) ist auch nicht unbedingt erwünscht, aber wenn man weiß was man tut (oder zufällig das richtige Rezept hat), kann man damit leben.
 - Schön wär's wenn man das haben könnte. Aber der japanische Schmied konnte sich das genauso wenig aussuchen wie sein keltischer, indischer oder assyrische Kollege.
- Was er sich aus dem Haufen bröseligen Eisen-Schlacke Gemischs (der "**Luppe**" (englisch "**bloom**")) aussuchen konnte, waren Bröckchen verschiedener Zusammensetzung - mit mehr oder weniger Kohlenstoff und Dreck.
- Dazu gehörte einige Erfahrung - er geht nach Farbe, Textur, ob die Stücke weiter oben oder weiter unten in der Luppe liegen; jeder Schmied wird seine eigene Methode und Tricks gehabt haben
 - Die Bröckelchen **einer** Sorte - etwa **cm** groß - schmiedet er dann bei **ca. 800 °C** zu einer dünnen Platte zusammen. Die richtige Temperatur kann er nicht messen, er schaut auf die Farbe der Glut (deswegen sind Schmieden immer dunkel). Das Zusammenschmieden oder -schweißen klappt ganz gut - vorausgesetzt, natürlich, der **C**-Gehalt ist unter **1,5 %**.
 - Zumindest die "harte" Sorte wirft er dann zum gewaltsamen Abkühlen in kaltes Wasser (deswegen eine dünne Platte). Stimmt alles, ist das Plättchen jetzt sehr hart - und sehr spröde; haut er mit dem Hammer drauf, bricht es in viele kleine Stücke. Die schmiedet er wieder zusammen.
- Hat alles geklappt, hat er jetzt genügend Platten mit verschiedenen Kohlenstoffkonzentration; daraus entsteht das Schwert.
- Allerdings dürfen die Platten nicht die Konzentration haben, die im fertigen Produkt vorliegen soll. Denn durch das jetzt folgende Schmieden - x-mal heißmachen und klopfen - ändert sich die Ausgangskonzentration. Sie wird - je nach dem - entweder größer oder kleiner.
 - **Kleiner** wird sie, falls die Ausgangskonzentration relativ hoch war, weil der dann Kohlenstoff im heißen, oxidierenden Teil des Feuers "abbrennt". Das wird unserem japanischen Schmied für seinen kohlenstoffreichen Teil passieren: Er selektiert deshalb Stückchen so um **1 % - 1,5 % C**, damit er zum zum Schluß dann die optimalen **0,6 % - 0,7 %** hat.
 - **Größer** wird die Kohlenstoffkonzentration, falls vorher eher nicht viel da war, und im reduzierenden Teil des Holzkohlenfeuers Kohlenstoff ins Eisen diffundiert.
 - Damit ist schon mal klar, dass der Schmied schon bei der Auswahl seiner Holzkohle höllisch aufpaßt, dass es die "richtige" ist.
- Als nächstes wird er die Platten **homogenisieren**. Dazu schweißt er mehrere (**6** oder **7**, um genau zu sein) zu einen Paket zusammen, das er dann mehrfach (**10 - 15** Mal) dünn klopft, faltet, und wieder zusammenschweißt.
- Das hat nichts mit "Damaszenerstechnik" im Sinne des Zusammenschweißens verschiedener Materialien zu tun. Hier geht es darum **ein** möglichst homogenes Material zu erhalten.
 - Zum Schluß wird das Werkstück in die Form eines länglichen Quaders geklopft und, im heißen Zustand, der Länge nach teilweise geteilt, so daß es wie ein **V** aussieht. Also etwas so wie der hellere Teil des im folgenden Bild gezeigten Schwertquerschnitts.
- Für ein verhältnismäßig simples Schwert, passiert jetzt mehr oder weniger genau dasselbe mit dem weicheren Stahl.
- Nur die Endform ist etwas anders, nämlich so dass das ganze Stück in den Ausschnitt des härteren Teils paßt.
- Das Paket - das jetzt, wenn man will, ein **richtiger** Damaszenerstahl**verbund** ist, wird jetzt bei der richtigen Temperatur in die gewünschte Form der Klinge gehämmert.
- Ein einziger falscher Hammerschlag (von vielen tausenden), oder einmal die falsche Temperatur beim richtigen Schlag, reicht dann aus, um nur noch ein Stück wertlosen Schrotts zu haben.
 - Wenn alles gut geht (und nach dem Schleifen), sieht der Querschnitt so aus wie nebenstehend gezeigt.



■ Hat man aber die gewünscht Klingenform sauber hinbekommen, beginnt jetzt der **schwierige** Teil: Die thermische Behandlung der Klinge

- Das ist wirklich so! Ein Lehrling mußte zwar etliche Jahre seiner Ausbildung für den bereits beschriebenen Teil aufwenden, aber etwa genauso viel Zeit für den jetzt folgenden Teil.

■ Die Klinge wird in "Lehm" "eingepackt", gleichmäßig "erhitzt", und dann in einer mehr oder weniger kalten Flüssigkeit (Wasser?) "abgeschreckt".

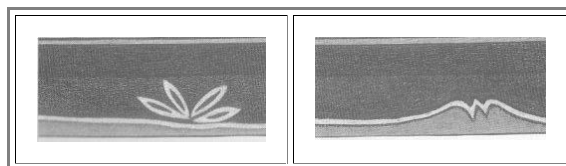
- Der "Lehm" enthält zwar auch Lehmähnliches, aber auch noch dies und das - jeder Schmied hat sein ultra geheimes Rezept dafür.
- Das "Einpacken" geschieht so, daß die Lehmschicht im Schneidenbereich dünner ist als weiter oben; außerdem wird die Dicke noch entlang der Schneide gezielt variiert.
- Das Erhitzen geschieht auf **helles Kirschrot** - jedenfalls über **720 °C**. Die genaue Temperatur ist wichtig, wenn auch von Schmied zu Schmied leicht verschieden; sie wird nur durch die Glühfarbe bestimmt. Auch auf die Glühdauer kommt es an. Hier hilft das Rezitieren der geheimen magischen Beschwörungsformel - wie sonst sollte der Schmied immer dieselbe Zeit einhalten (und das Geheimnis, selbstredend erst auf dem Totenbett, dann an den Lieblingslehrling weitergeben)?

■ Was der Schmied dabei macht nennen wir heute **Härten** durch Abschrecken - bitte im [Geschichte des Stahls](#) nachlesen (hier der Link zur [neusten englische Version](#)) oder im [wissenschaftlichen Teil](#).

- In Kurzform: Bei Raumtemperatur ist das bevorzugte Gefüge des Stahls eine Mischung aus kubisch-raumzentriertem (**bcc**) **Fe** und **FeC₃**; dieses Gefüge heißt **Perlit**. Seine mechanischen Eigenschaften hängen von der Kohlenstoffkonzentration ab; sie sind besser als reines Eisen, aber nicht besonders bemerkenswert - halt "normaler" Stahl.
- Oberhalb von **720 °C** wird der Stahl kubisch-flächenzentriert (**fcc**); der Kohlenstoff ist atomar gelöst (bis maximal **2%**).
- Kühlt man nun **langsam** ab, erhält man wieder hauptsächlich Perlit; kühlt man aber schnell ab (durch "Abschrecken" in z.B kaltem Wasser), reicht die Zeit nicht aus um **FeC₃** zu bilden, und es bildet sich eine neue, eigentlich instabile Phase, die **Martensit** heißt
- Kohlenstoffhaltiger Martensit ist **extrem hart** - ca. **4** mal härter als Perlit bei gleicher Kohlenstoffkonzentration - aber auch sehr spröde.

■ Da die Schneide jetzt sehr viel schneller abkühlt als der durch dicken Lehm geschützte Körper, besteht sie aus hartem Martensit, der dann in den normalen Perlit übergeht (immer noch vergleichsweise hart im äußeren Bereich und relativ weich, aber duktil im Inneren)

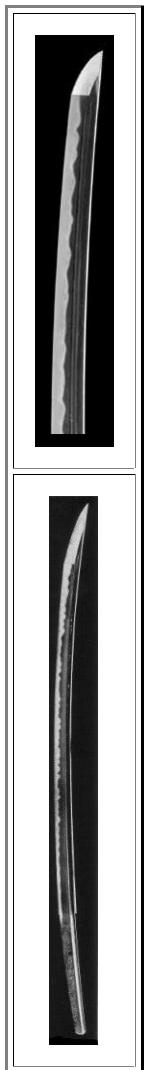
- Das kann man bei einer Inspektion der Klinge sehen: der Schneidenbereich glänzt etwas anders als der Körper; der sichtbare Übergangsbereich heißt **"Hamon"** und ist extrem wichtig bei der Bewertung japanischer Schwerter.
- Die Bilder rechts zeigen das "Hamon" sehr deutlich (nach Bildbearbeitung); die Welligkeit ist absichtlich; der Kenner unterscheidet **> 20** Varianten.
- Wie gut die japanischen Schmiede diese Prozedur im Griff hatten, zeigte sich in der Edo Ära (**1684 -1763**), in der Musterchen aufkamen wie unten gezeigt,



- Das ist natürlich nicht mehr seriös sondern Spielerei; in den Worten der [japanischen Quelle](#): "This means that Samurai corrupted". Wer will da widersprechen.

■ Man kann sich leicht vorstellen, dass beim Eintauchen eines rotglühenden Gebildes aus Stahl und Lehm in kaltes Wasser [so manches schiefgehen kann](#).

- Das ist einer der Gründe, warum selbst ein Meisterschmied ziemlich viel Ausschuß produziert, und gerade mal **< 10** Schwerter pro Jahr produziert, die dann, falls von einem **heutigen**, als "lebender Nationalschatz" quasi offiziell heiliggesprochenen Schmied gekauft, leicht **> 20.000 €** kosten. **Antike** Schwerter von Meisterschmieden sind heute schlicht unbezahlbar.



- Soweit zum einfachen Teil. Wenn man wirklich die Schmiedekunst der Japaner bewerten will, muß man jetzt noch die **Komplikationen** berücksichtigen:
 - Die Eigenschaften des Stahls hängen nicht nur vom Kohlenstoffgehalt und vom Abschrecken ab, sondern auch noch der Hämmererei; das Stichwort ist [Verformungsverfestigung](#).
 - Wieviel Kohlenstoff letztlich in welchem Teil der Klinge ist, hängt vom Ausgangsmaterial ab sowie von der Art der Bearbeitung.
 - Was an zusätzlichen Elementen sich noch im Stahl befindet, [kann enormen Einfluß haben](#), aber auch das hängt von der Bearbeitung ab und insbesondere von der Art des Erzes, aus dem das Eisen gewonnen wurde. Hier ist wohl die Hauptquelle der regionalen Qualitätsunterschiede.
 - Wer was auf sich hielt, hat nicht nur **2** Sorten Stahl zusammengeschiedet, sondern **3** oder **4**; der [Querschnitt wird dann recht kompliziert](#).
- Kein Wunder, dass sich um das japanische Schwert ganze Berufszweige entwickelt haben - und (witzige) Wundergeschichten über die Schwerter und ihre Besitzer [4\)](#)
 - Aber man muß das nicht ernster nehmen als die [Wundergeschichten über westliche Schwerter](#) etc. Außer dass die Japaner ihre Superschwerter natürlich sorgfältig testeten (und das Ergebnis in die Klinge gravierten) so dass wir auch heute noch eine Idee davon haben, was man mit so einem Schwert alles anrichten kann. Nur starke Naturen sollten [diesen Link](#) betätigen
- Man sollte lieber mal die andere Seite sehen: Die Erfolgsgeschichte des japanischen Schwerts führte zur "Stasis", zur Lähmung der Weiterentwicklung der Metallurgie.
 - Durch Versuch und Irrtum hatte man ein ziemlich optimales Produkt hingekriegt. Man hatte aber nicht den kleinsten Schimmer einer Ahnung warum die Sache funktionierte.
 - Jede Abweichung von der in kleinsten Details feststehenden Technologie war ein Sakrileg; das durfte nicht sein. "Fortschritt" gab es nur noch in unwesentlichen Details - z.B. am Design des Griiffs - und minimalste Änderungen lösten ähnlich heftige Emotionen aus wie heutzutage Längenvariationen in **cm** Bereich bei Rocksäumen und Hosenbeinen.

Der Rest der Welt

- Kein Japaner wird das jemals zugeben, aber als Commodore Matthew Perry von der United States Navy am **8. Juli 1853** Japan zur "Öffnung" zwang (mit Kriegsschiffen), waren die Standardsäbel, die seine Soldaten herumschleppten, den japanischen Schwertern wohl kaum unterlegen - und diese Säbel waren noch deutlich schlechter als die einige Jahrzehnte später üblichen Gußstahlsäbel.
 - Wobei man sich darüber klar sein muß, dass "besser" oder "schlechter" in diesem Zusammenhang zwei verschiedene Dinge bedeutet:
 1. Welches "Schwert" würde in einen Kampf "gewinnen"?
 2. Welches Schwert hat die besseren technischen Daten?
 - Auf beide Fragen gibt es aber keine eindeutigen Antwort. Welches Schwert "gewinnen" würde hängt von der Kampftechnik ab. Ein japanischer Samurai hätte trotz metallurgisch wohl "besseren" Schwerts keine Chance gegen einen Ritter in voller Rüstung mit seinem vergleichsweise primitiven "Breitschwert"-Prügel.
 - Es gibt auch kaum harte Daten zur zweiten Frage; einige Zahlen finden sich im [Link](#).
- Eines aber soll deutlich gesagt werden: **Kein** Schwert - japanisch, magisch, modern - kann die tollen Dinge tun, die in den Legenden (und im Internet) bis heute fortleben.
 - Ein Seidentuch, das auf die Schneide eines Damaszenersäbels **fällt**, wird **nicht** durchschnitten. Kein Schwert durch **schlägt** eine Stahlrüstung (durch **stoßen** - OK), und wenn zwei ordentliche Schwerter mit den Schneiden aufeinanderprallen, haben **beide** kräftige Scharten. Wer mit seinem Schwert auf einen Stein oder Amboß haut, hat danach ein gebrochenes oder beschädigtes Schwert, und immer noch **einen** Stein oder Amboß.
- Was man aber schon sagen kann ist:
 - Die Metallurgie der "Kelten" war mindestens genauso weit entwickelt wie die der Japaner - nur schon viel hundert Jahre früher. Ihre [Torsionsschweißdamastschwerter](#) waren extrem kompliziert aufgebaut, wie ihre japanischen Kollegen von atemberaubender Ästhetik, und nach manchen antiken Berichten extrem "gut" und entsprechend begehrt. Es ist möglich, dass die Kelten eine extrem komplizierte Technik entwickeln mußten, weil ihr **"Raseneisenerz"** ziemlich schlecht ist (d.h. viel **P** und **S** enthält)
 - Der noch ältere römische **"Gladius"** (ein Kurzsword zum Stechen) und der **"Spatha"** (das Langsword der Offiziere) waren wohl auch nicht schlecht; obwohl nicht besonders kompliziert aufgebaut (man weiß aber nicht sehr viel darüber). Möglicherweise profitierten die Römer vom Zugriff auf gutes spanisches Erz.
 - Die wohl aber echten Meister der frühen Eisen- und Stahltechnik waren die "Inder". Am Rande noch die "Chinesen", wobei letztere sich vor **2000** Jahren oder so aber überwiegend auf eine sehr hochentwickelte und nur für zivile Zwecke genutzten **Gußeisen**technik beschränkten.

■ Aus Indien kam "**Wootz**", das Synonym für sehr kohlenstoffreichen Stahl aus dem dann die "[echten](#)" Damaszenerschwerter geschmiedet wurden.

- Dabei gab es jede Menge Geheimnisse. Obwohl moderne Materialwissenschaftler in Anspruch nehmen, das "Geheimnis" gefunden zu haben (und sich, wie immer, auch streiten wer wirklich recht hat) [Z](#) wird das von "Wootz" Fans (deren Zahl rasch zunimmt) durchaus bezweifelt.
- Man suche nach den Artikeln der Materialwissenschaftsprofessoren [Verhoeven](#) und [Wadsworth](#) um einen kleinen Eindruck über die derzeitige wissenschaftliche Diskussion zu bekommen. Im Internet findet man dann eine unabsehbare Zahl von Seiten zum Thema.

1) Jedes Kind in Spanien kennt El Cid Campeador, einen sagenhaften Ritter aus dem **11.** Jahrhundert. Er hat gegen die Mauren gekämpft und die Stadt Valencia erobert. Sein Schwert **Tizona** wurde im Jahre **1040** geschmiedet; es gehörte dem Maurenkönig Bujari. El Cid hat Bujari besiegt und sein Schwert als Beute behalten. Nach El Cids Tod ging Tizona von Hand zu Hand, seit **1944** ist Tizona (als Leihgabe) im Heeresmuseum in Madrid. Der Griff ist übrigens nicht mehr das Original sondern viel später montiert worden (sein Gebrauchswert liegt offensichtlich auch eher im Angeben als im Schläge abfangen). Eigentlich gehört Tizona aber dem heutigen Marquis de Falces. Er will Tizona nun verkaufen, am liebsten an den spanischen Staat - für **6.000.000 €**. Der spanische Staat bezweifelte erstmal, dass das Schwert überhaupt echt ist; mehrere Gutachten konnten aber weder Echtheit noch Falschheit beweisen. Vorsichtshalber wurde erst mal ein Ausfuhrverbot verhängt, was den Marquis mächtig ärgern soll.

Das war nach einem Bericht der FAZ der Stand im April **2003**. Wie die Geschichte ausgehen wird ist z.Z. unklar; aber wir lernen doch zwei Dinge:

- Die Faszination der Sagenschwerter ist ungebrochen - **6 Mio €** für ein Symbol sind ja kein Pappenstiel.
- Bei diesen Werten ist es auch kein Wunder, dass es kaum richtige metallographische Untersuchungen an diesen Artefakten gibt.

2) Three swords are carried before the (*british*) monarch during the service and procession: The Sword of Temporal Justice, of Spiritual Justice, and the Sword of Mercy (named **Curtana**). At her coronation Elizabeth **II** was girded with the legendary sword Curtana which has a truncated blade and lacks a point because royal justice ought to be tempered by Mercy, hence it is also called The Sword of Mercy. They can be seen as referring to Elizabeth II's position as Commander-in-Chief of the forces, Her Majesty's Services and to her title 'Defender of the Faith'.

3) Dieses Bild stammt aus einer ganz interessanten japanischen Quelle (dort kann man auch nachschauen, wie japanische Schwerter getestet wurden): [Japanese Sword School](#)

Eine der besseren "Websites" zum Thema "Japanische Schwerter" (= nihonto) ist [Nihonto - Japanese Sword](#)

4) Once the Shogun gave a reception to honor the best swordsmen in Japan. All the top samurai were in attendance along with Court nobles and beautiful geisha. A geisha approached the third highest ranked swordsmen and asked; "Sir, can you demonstrate your sword skills for me?" At once, the samurai drew his sword and cut a hovering fly in half. "Very impressive", said the geisha. When she saw the samurai who was the second highest ranked swordsmen in Japan she asked him the same question. He immediately drew his sword and with two quick strokes quartered a fly. "Most impressive", said the geisha. Then she spotted the samurai that was the highest ranked swordsmen in all of Japan. "Honorable Sir", she said "would you be so kind as to demonstrate your sword skill for me?". The samurai drew his sword and cut into the air in the direction of a nearby fly, but the fly buzzed away. "Oh, so sorry you missed", said the geisha. "But I didn't miss", said the samurai humbly "that male fly will no longer be able to have offspring."

5) Aristotle noticed: "Wrought iron indeed will melt and grow soft, and then solidify again. And this is the way in which 'steel' is made. For the dross (= Krätze, Schlacke, Unrat) sinks to the bottom and is removed from below, and by repeated subjection to this treatment the metal is purified and 'steel' is produced."

6) In Deutschland gilt, durch den Bestseller "Bildung" des Herrn **Schwanitz** überflüssigerweise nochmals bestätigt, dass Naturwissenschaft und Technik nicht Teil des unabdingbarem Bildungskanons sind, und damit auch nicht so recht zur Kultur gehören. In Japan würde man mit einer Person, die derartige Ansicht vertritt, ganz langsam und vorsichtig reden, und dann die schnelle Einlieferung in eine angemessene Institution veranlassen (und das wäre nicht die Feuilleton Redaktion einer Zeitung).

7) Aus einem [Verhoeven Artikel](#) (Deutsch im "*Spektrum der Wissenschaft*" **10/2001**): "Schon **1824** verkündete Jean Robert Bréant in Frankreich, er hätte das Geheimnis der muslimischen Klingenschmiede gelüftet. Wenig später erhob der

Russe Pavel Anosoff denselben Anspruch. Im **20. Jahrhundert** gab es ähnliche Behauptungen – zuletzt von Oleg D. Sherby und Jeffrey Wadsworth (siehe "Damascus Steels", Scientific American, Februar **1985**). Aber in keinem Fall ließen sich mit den vorgeschlagenen Methoden Schwerter herstellen, die in Aussehen wie Gefüge den alten Originalen in zufriedenstellendem Maße gleichen".

Aus einem **Wadsworth** Artikel im **MRS Bulletin**, **12/2002**: *"More recently, Verhoeven has proposed an alternative explanation for the creation of a surface damask.... . In the opinion of Wadsworth and Sherby, this complex procedure (the Verhoeven method) may also provide a mechanism to allow austenite grains to grow (i.e. it might do the same thing as Wadsworth suggested, and not what Verhoeven says). Certainly the Wadsworth - Sherby method can in fact be used to create a "woodlike" structure closely resembling those found in genuine Damascus blades... . In the spirit of retaining blacksmithing secrets, the details of this modification ... remain with Wadsworth and Sherby. After Wadsworth and Sherby published their 1985 paper in Scientific American, Smith, the great metallurgical historian, cautioned that their work would not be the last word on the subject. He was correct, and his caution to other researchers in this field is as accurate today as it was then".*

8) Aus dem Dankesbriefs von Theoderich ("Dietrich von Bern) vermutlich an Thrasamund, den König der Vandalen:

"Zusammen mit schwarzen Stämmen (der Mooreiche) und heimischen blonden Knaben (!!!) hat Eure Brüderlichkeit Schwerter für uns ausgewählt, die sogar imstande sind Rüstungen zu durchschneiden, und die ich mehr noch ihres Eisens als wegen des Goldes auf ihnen preise. So glänzend ist ihre polierte Klarheit, daß sie mit genauer Deutlichkeit die Gesichter derjenigen widerspiegeln, die auf sie schauen. So gleichmäßig verlaufen ihre Schneiden zur Spitze, daß man annehmen möchte, sie seien nicht mit Feilen hergestellt, sondern im Schmelzofen geformt. Ihre Mitte, mit schönen Vertiefungen ausgehöhlt, erscheint wie mit Würmlein gekräuselt, und hier spielen so mannigfache Schatten, daß man glauben möchte, das glänzende Metall sei mit vielen Farben verwoben. dieses Metall ist auf Eurem Schleifstein geschliffen und mit Eurem glänzendsten Pulver so beharrlich poliert, bis sein stählerner Glanz ein Spiegel der Männer wird; dieses Pulver wird Euch unter den natürlichen Schätzen Eures Landes gewährt, sodaß sein Besitz Euch einzigartigen Ruhm bringen möge. Solche Schwerter möchte man in ihrer Schönheit für das Werk Vulkans halten, von dem gesagt wird, daß er mit solcher Geschicklichkeit sein Handwerk veredelt habe, daß alles, was von seinen Händen gestaltet wurde, nicht mit menschlicher, sondern mit göttlicher Kraft gefertigt zu sein schien(...)"

Multiple Choice Test zu

4.1.1 Was sind Defekte?

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1.2 Nulldimensionale Defekte

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1.3 Versetzungen: Definition und strukturelle Eigenschaften

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1.4 Versetzungen und plastische Verformung

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1.5 Flächenhafte Defekte

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1.6 Volumendefekte

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.1 Allgemeine Definitionen und Klassifikation von Defekten

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

4.2. Beziehungen zwischen Defekten und Gefüge

Start Multiple Choice


Multiple Choice Test zu





4. Reale Kristalle

Start Multiple Choice

Übung 4.1-1

Si in der $\langle 110 \rangle$ Projektion und HRTEM

 **Hinweis:** Die Lösungen zu [Übung 3.3-2](#) können hier direkt verwendet werden.

-  Zeichne einen Silizium Kristall in der $\langle 110 \rangle$ Projektion. Gegenüber der Zeichnung in Übung 3.3-2 müssen jetzt *zwei* Atome in der Basis berücksichtigt werden.
-  Zeige, daß die **HRTEM** Abbildung des Siliziumkristalls in den [elektronenmikroskopischen Aufnahmen](#) unmittelbar die Kristallstruktur wiedergibt, falls man annimmt, daß die hellen Flecken entweder
-  den offenen Kanälen in dieser Projektion entsprechen,
 -  oder aber der Projektion der zick-zack-Kette von Atomen in der $\langle 110 \rangle$ - Richtung.



Lösung

Übung 4.1-2

Versetzungsdichte als Flächendichte




- Angenommen, in einem (würfelförmigen) Volumen sind beliebig viele statistisch verteilte gerade Linien (= Versetzungen), die alle parallel zu den Würfelkanten verlaufen und damit immer an irgendeiner Oberfläche beginnen und enden.
- Zeige, daß die Versetzungsdichte dann durch die *Dichte der Durchstoßpunkte* der Versetzungen an den Oberflächen gegeben ist; d.h. die *Flächendichte* der Durchstoßpunkte ist direkt korreliert zur *Gesamtlänge pro Volumeneinheit*.
 - Überlege, ob diese Gleichheit auch noch gilt, wenn die Versetzungen beliebig gekrümmt laufen dürfen, insbesondere sogar geschlossene Ringe bilden können?
 - Ändert sich etwas, wenn wir statt der Dichte der Durchstoßpunkte auf der *Oberfläche* des makroskopischen Körpers, die Dichte der Durchstoßpunkte auf einer beliebigen (gedachten) Ebene durch den Kristall nehmen?
 - Läßt sich daraus ein Rezept für die Messung der Versetzungsdichte in einem Kristall ableiten (Wir unterstellen, daß man die Durchstoßpunkte sichtbar machen kann)?



Lösung

Übung 4.1-3

Grenzflächenenergie pro Atom

-  Berechne die Grenzflächenenergie γ_{Atom} *pro Atom*.
-  Für die Grenzflächenenergie können [typische Werte](#) benutzt werden, z.B.
- $\gamma = 10 \text{ mJ/m}^2$
 - $\gamma = 100 \text{ mJ/m}^2$
 - $\gamma = 1000 \text{ mJ/m}^2$
-  Betrachte einfache Gitter mit realistischen [Gitterkonstanten](#).

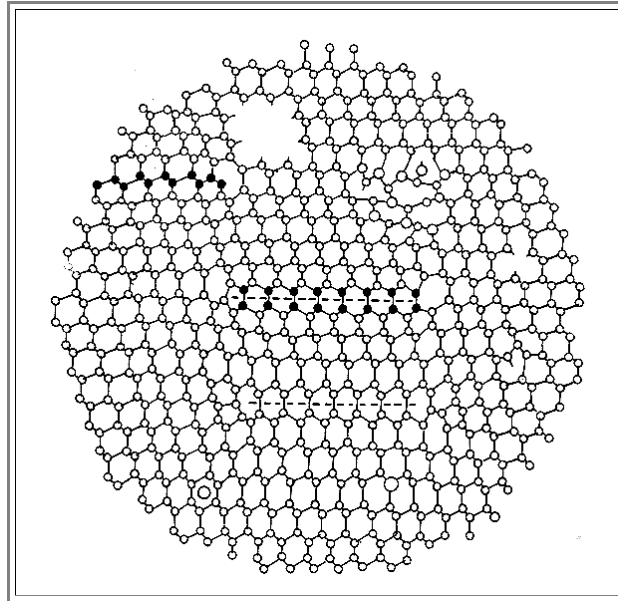


Lösung

Übung 4.2-3

Defekte im Diamantgitter erkennen

Nachfolgend eine [<110> Projektion des Diamantkristalls](#) mit einer Fülle von Defekten



1. Können Sie alle Defekte finden und ansprechen?
2. Sind die Versetzungskerne eindeutig gezeichnet? Gäbe es auch andere Möglichkeiten?
3. Wie viele Sorten Leerstellen gibt es? Sind die Plätze für Leerstellen verschieden?
4. Wie ist das mit dem **ZGA**? Ist es "richtig" eingezeichnet, oder gäbe es auch andere Möglichkeiten?



Lösung

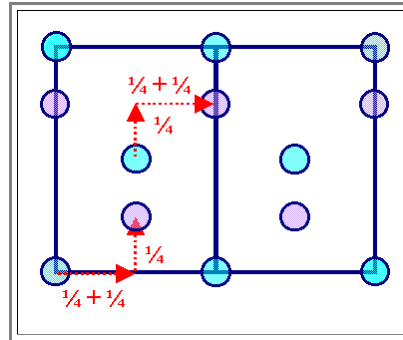
Lösungen zur Übung 4.1-1

Si in der $\langle 110 \rangle$ Projektion und HRTEM

Illustration

Zeichne einen Silizium Kristall in der $\langle 110 \rangle$ Projektion. Gegenüber der Zeichnung in Übung 3.3-2 müssen jetzt **zwei** Atome in der Basis berücksichtigt werden.

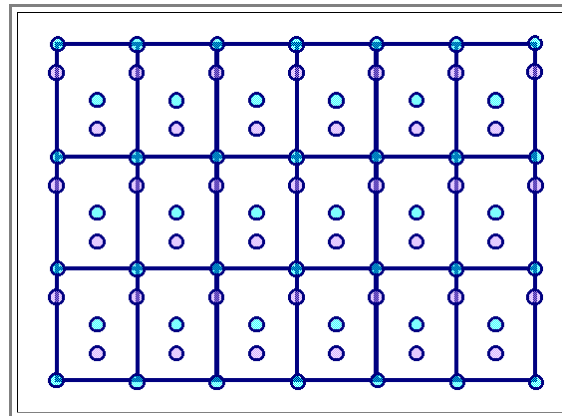
Die Projektion der EZ sind dann so aus:



- Auf jedem **Gitterpunkt** (hellblaue Kreise) sitzt ein **Atom**, und dann ein weiteres im Abstand ($\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$). Dabei kann jeder Gitterpunkt als Ursprung dienen; wir erhalten **5** weitere Atome (hellviolett), die in die **EZ** "passen".
- Obwohl das sehr ähnlich aussieht wie die **EZ** der [Übung 3.3-2](#), haben wir einen großen Unterschied: Hier ist ein **Kristall** dargestellt, dort war es ein **Gitter**!

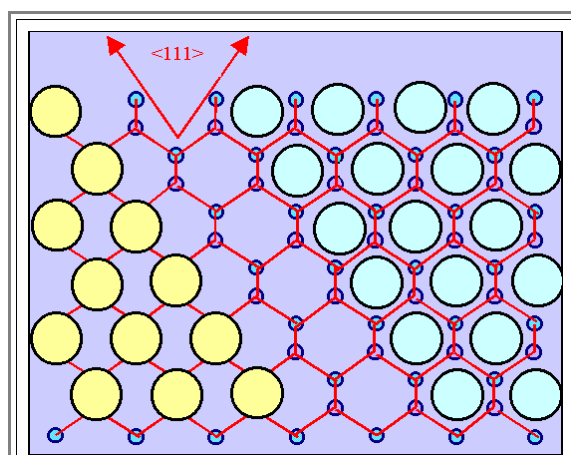
Zeige, daß die **HRTEM** Abbildung des Siliziumkristalls in den [elektronenmikroskopischen Aufnahmen](#) unmittelbar die Kristallstruktur wiedergibt, falls man annimmt, daß die hellen Flecken entweder den offenen Kanälen in dieser Projektion entsprechen, oder aber der Projektion der zick-zack-Kette von Atomen in der $\langle 110 \rangle$ - Richtung.

Also müssen wir erst mal ein größeres Gebiet des Kristalls zeichnen. Das sieht so aus:



Die Struktur wird besser sichtbar, wenn man die nächsten Nachbaratome verbindet - damit werden automatisch die $\{111\}$ Ebenen markiert.

- Dann müssen wir nur noch die offenen Kanäle oder den "Atomzweier-Pack" markieren, und wir erhalten folgendes Bild:



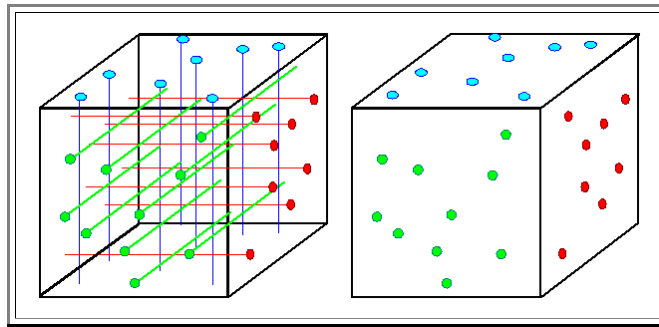
- Damit ist klar, daß die hellen Flecken entweder den offenen Kanälen in dieser Projektion entsprechen, oder aber der Projektion der zick-zack-Kette von Atomen in der $\langle 110 \rangle$ - Richtung.

Lösungen zur Übung 4.1-2

Versetzungsdichte als Flächendichte

Illustration

- Angenommen, in einem (würfelförmigen) Volumen sind beliebig viele statistisch verteilte gerade Linien (= Versetzungen), die alle parallel zu den Würfelkanten verlaufen und damit immer an irgendeiner Oberfläche beginnen und enden.
- Zeige, daß die Versetzungsdichte dann durch die *Dichte der Durchstoßpunkte* der Versetzungen an den Oberflächen gegeben ist; d.h. die *Flächendichte* der Durchstoßpunkte ist direkt korreliert zur *Gesamtlänge pro Volumeneinheit*.
- Die erste Frage ist relativ trivial; das Bild macht das klar:



- Die Gesamtlänge der Versetzungen ist gleich der Zahl der Durchstoßpunkte N (nur auf einer Fläche gezählt) mal Kantenlänge a des Würfels mal 3 um die anderen Flächen zu berücksichtigen. Wir haben also für die Versetzungsdichte ρ

$$\rho = \frac{3 \cdot N \cdot a}{a^3} = \frac{3 \cdot N}{a^2}$$

- Die Flächendichte der Durchstoßpunkte ist also bis auf den Faktor 3 identisch mit der Versetzungsdichte.
- Überlege, ob diese Gleichheit auch noch gilt, wenn die Versetzungen beliebig gekrümmt laufen dürfen, insbesondere sogar geschlossene Ringe bilden können?
- Die Gleichheit Flächendichte = $1/3$ Volumendichte gilt in diesem Fall nicht mehr in voller Allgemeinheit.
 - Das ist leicht zu sehen; man muß sich nur einige geschlossene Versetzungsringe im Volumen vorstellen. Die Flächendichte ist dann $= 0$, die Volumendichte aber nicht.
 - Auch für "krumme" Versetzungen, deren Länge zwischen den Durchstoßpunkten $> a$ ist, kann die Beziehung offenkundig nicht völlig korrekt sein.
- Ändert sich etwas, wenn wir statt der Dichte der Durchstoßpunkte auf der *Oberfläche* des makroskopischen Körpers, die Dichte der Durchstoßpunkte auf einer beliebigen (gedachten) Ebene durch den Kristall nehmen?
- Ja, das ist eine neue Situation. Wir schneiden jetzt z. B. auch einige der vorhandenen Versetzungsringe.
 - Nehmen wir an, die Dichte der Versetzungsringe ist N_{Ring} ; ihr mittlerer Radius r_{Ring} . Eine beliebige Ebene schneidet dann $N^{2/3}$ der Versetzungsringe (das ist [analog zur Flächendichte der Atome](#) zu berechnen; der mittlere Abstand ist $N^{-1/3}$, und $r_{\text{Ring}} < N^{-1/3}$ vorausgesetzt). Ein Versetzungsring macht im Prinzip zwei Durchstoßpunkte; die Dichte an Durchstoßpunkten ist also $2 \cdot N^{2/3}$.
 - Die Versetzungsdichte eines Ensembles von Ringen wäre jedoch $\rho = N_{\text{Ring}} \cdot 2 \cdot \pi \cdot r$, die Dichte der Durchstoßpunkte ist also nicht identisch mit der Versetzungsdichte.
 - Identität hätten wir nur falls $\pi \cdot r = N^{-1/3}$, d.h. falls der halbe Umfang der Ringe etwa identisch ist zum mittleren Abstand.
- Das ist auch sinnvoll: Sind die Ringdurchmesser größer als der mittlere Abstand, bekommen wir mehr Durchstoßpunkte, sind sie sehr viel kleiner verliert die Angabe einer Versetzungsdichte als Länge pro cm^3 ihren Sinn (sehr viele sehr kleine Versetzungsringe als kleine Versetzungsdichte zu zählen ist einfach nicht sinnvoll).
 - Falls wir nicht Versetzungsringe, sondern beliebig gekrümmte Versetzungen betrachten, ist die Lage ähnlich. Die Dichte der Durchstoßpunkte ist nicht identisch mit der Versetzungsdichte, kann aber eine gute Näherung sein, falls die Versetzungen nicht ganz "pathologisch" durch den Kristall verlaufen.

■ Läßt sich daraus ein Rezept für die Messung der Versetzungsdichte in einem Kristall ableiten (Wir unterstellen, daß man die Durchstoßpunkte sichtbar machen kann)?

- Ja!. Bestimme die Dichte der Durchstoßpunkte auf mehreren nicht koplanaren Ebenen (z.B. durch mehrfaches Anschleifen und neu messen).
- Falls man jedesmal in etwa die gleiche Dichte an Durchstoßpunkten bekommt, kann man mit einiger Sicherheit annehmen, dass:
 1. Die Versetzungen homogen verteilt sind
 2. Die Dichte der Durchstoßpunkte ein gutes Maß für die tatsächliche Versetzungsdichte ist.

■ Wie man die [Durchstoßpunkte sichtbar machen kann](#), ist im Hyperskript "Defects" beschrieben.

Lösungen zur Übung 4.1-3

Grenzflächenenergie pro Atom

Illustration

Berechne die Grenzflächenenergie γ_{Atom} *pro Atom*.

Entscheidend ist die Dichte ρ_G der Atome pro m^2 Grenzfläche.

- Für einen **fcc** Kristall mit der Gitterkonstante **a**, und einer **{100}** Ober- oder Grenzfläche haben wir **2** Atome pro **a²**
- [Gitterkonstanten](#) zwischen **0.3 nm** und **0.5 nm** umfassen die meisten **fcc** Elementkristalle; wir haben also

$$\rho_G = \frac{2}{0.09} \dots \frac{2}{0.025} \approx (20 \dots 80) \text{ nm}^{-2} \approx (2 \dots 8) \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$$

Wir haben also $(2 \dots 8) \cdot 10^{19}$ Atome auf einem m^{-2} **{100}** Fläche. Für andere Flächen wird es nicht sehr viel anders sein können, wir nehmen diesen Wertebereich als repräsentativ.

[Weiterhin gilt](#)

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ mJ} = 6 \cdot 10^{15} \text{ eV}$$

Mit diesen Zahlenwerten erhalten wir

$$\gamma_{\text{Atom}} = \begin{cases} \frac{6 \cdot 10^{16} \text{ eV}}{(2 \dots 8) \cdot 10^{19}} = (0.8 \dots 3) \cdot 10^{-3} \text{ eV} & \text{für } \gamma = 10 \text{ mJ/m}^2 \\ \frac{6 \cdot 10^{18} \text{ eV}}{(2 \dots 8) \cdot 10^{19}} = (0.8 \dots 3) \cdot 10^{-1} \text{ eV} & \text{für } \gamma = 1000 \text{ mJ/m}^2 \end{cases}$$

Das sind recht vernünftige Werte!

- Im "worst case", d.h. für maximal gestörte Bindungen, landen wir bei ca. **0.1 0,3 eV** pro Atom.
- Das ist weniger als die [typische Bildungsenergie](#) für Leerstellen, aber es sind auch immer noch Atome in der unmittelbaren Nachbarschaft vorhanden. Bindungen sind also nicht vollständig ungesättigt, sondern allenfalls sub-optimal.

Lösungen zur Übung 4.2-1

Defekte im Diamantgitter erkennen

Illustration

Die Fragen und die Antworten:

1. Können Sie alle Defekte finden und ansprechen?

Im Bild unten sind sie alle markiert

2. Sind die Versetzungskerne eindeutig gezeichnet? Gäbe es auch andere Möglichkeiten?

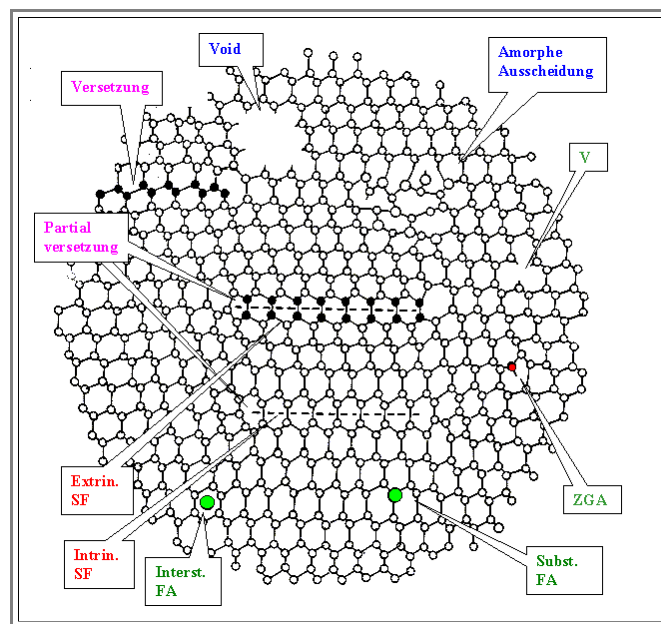
Der Kern ist *nicht* eindeutig: Nimmt man das letzte schwarz gezeichnete Atom bei der Versetzung weg, entsteht eine andere Konfiguration der Atome im Versetzungs-kern (die Fanatiker reden von "glide" und "shuffle" Versetzungen)

3. Wie viele Sorten Leerstellen gibt es? Sind die Plätze für Leerstellen verschieden?

Nur eine: Alle **Si**-Atome sind gleich, es ist egal welches man herausnimmt; alle Plätze sind gleich

4. Wie ist das mit dem **ZGA**? Ist es "richtig" eingezeichnet, oder gäbe es auch andere Möglichkeiten?

Es ist bestimmt nicht richtig eingezeichnet. Es gibt keine eindeutig "ins Auge springende" Möglichkeit ein zusätzliches Atom ins Gitter einzubauen. Mehrere Möglichkeiten sind denkbar; bis heute ist nicht ganz klar wie das genau aussieht.

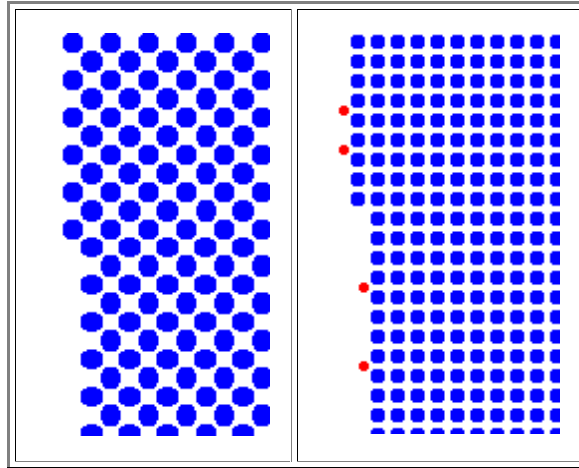


Diffusionsmechanismen

Illustration

Die beiden Graphiken zeigen vereinfacht die Diffusion von **Leerstellen** (linke Graphik) und von **Zwischengitteratomen** (rechte Graphik).

- Beim Leerstellenmechanismus wird zunächst eine Leerstelle erzeugt indem sich Oberflächenatome entsprechend verschieben. Die Leerstelle wandert durch Platzwechsel mit Gitteratomen. Würden sich substitutionelle Fremdatome im Gitter befinden, würden auch sie gelegentlich einen Diffusionssprung machen können.
- Beim interstitiellen Diffusionsmechanismus kann ein **ZGA** nur springen, wenn sich die Umgebungsatome gelegentlich mal zur Seite bewegen. Dies wird natürlich bei hoher Temperatur, wenn die Atome kräftiger um ihre Gleichgewichtslage schwingen, öfter geschehen als bei tiefen Temperaturen. Wir müssen deshalb erwarten, daß die interstitielle Diffusion mit zunehmender Temperatur schneller abläuft.

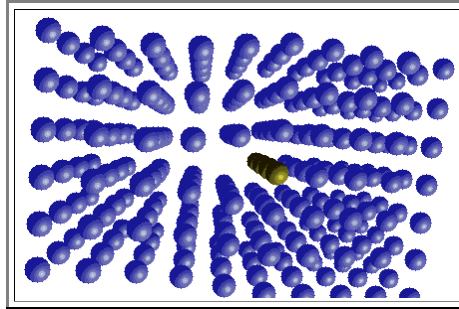


Perspektivische Darstellung einer einfachen Stufenversetzung

Illustration

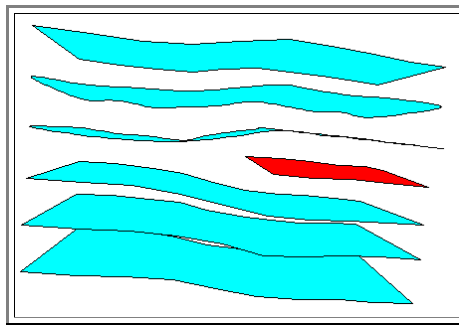
Die nachfolgende Graphik ist bewußt noch etwas unübersichtlich gehalten.

- Können Sie die eingeschobene (Halb)ebene finden? Die Versetzungslinie ist durch andersfarbige Atomkugeln markiert.



Schwer? Ist es tatsächlich. Während es relativ einfach ist, sich null- zwei- und dreidimensionale Defekte vorzustellen, machen die eindimensionalen Defekte erfahrungsgemäß große Schwierigkeiten.

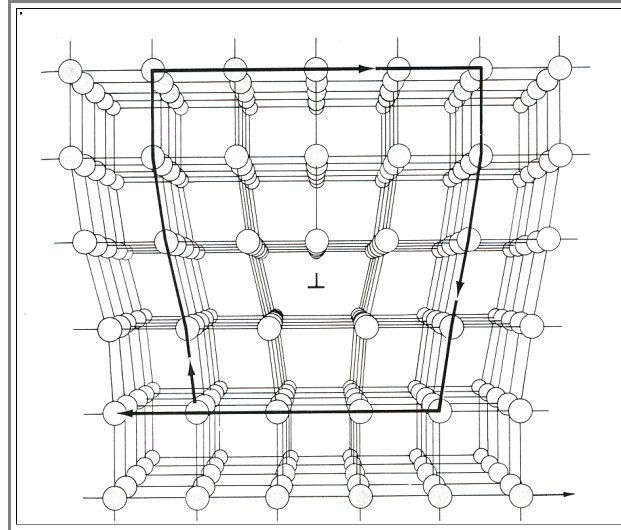
- Deswegen die Aufforderung, das zu üben. Man kann das immer noch tun: Malen Sie einen Kristall bestehend aus Ebenen, nehmen Sie ein Ebene zur Hälfte heraus, und fügen die entstandene Lücke so gut es geht wieder zusammen. Das gibt eine Stufenversetzung.
- Wie das richtig gemacht perspektivisch aussieht, sehen wir später.
- Hier ist die "Lösung" - gezeigt sind die Ebenen, auf denen die obigen Atome sitzen.



Übersichtliche perspektivische Darstellung einer einfachen Stufenversetzung

Die nachfolgende Graphik ist jetzt - im Gegensatz zu der [Eingangsgrafik](#) - bewußt übersichtlich gehalten.

- Wir schauen entlang der Versetzungslinie in den Kristall
- Ein **Burgersumlauf**, der im perfekten Kristall schließen würde, ist eingezeichnet.



Illustration

Diese Seite ist von der "[Japanese Sword School](http://www.hi-net.zaq.ne.jp/osaru/e_index.htm)" mit dem Link zum Original http://www.hi-net.zaq.ne.jp/osaru/e_index.htm

Sie gehört zur dunklen Seite der [magischen Schwerter](#) und ist nichts für schwache Nerven.

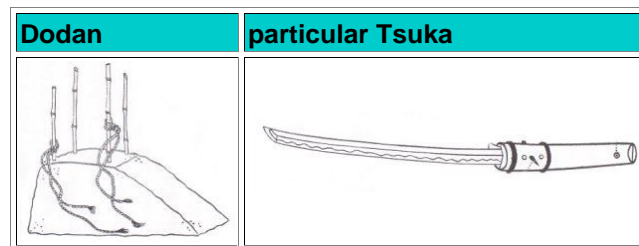
Wazamono

Wazamono means the swords which cut well. Tsuge who was a learned man of swords classified swords according to how cut well in 1797 (first half of Shinshintou). He classified in cooperation with a man who was a master swordsman and **Yamada Asaemon** who was a specialist of beheading. They classified mainly Shintou because the most Samurai in this time used Shintou at ordinary times. **They classified swords into 4 group according to how cut well.** That is, "**Saijou-Oowazamono**", "**Oo-Wazamono**", "**Yoki-Wazamono**", "**Wazamono**".

When they tried to see how well it cut, they chopped a man who was about 40 to 50 years old or a strongly-built man who attended to physical labor.

Yamada family (for generations) judged how well the swords of the Tokugawa family cut, each Daimyou agreed to their request. This was their regular business. And they beheaded criminals; this was a side job. They got a dead body of a criminal and they judged how cut well the sword of Tokugawa family or each Daimyou by chopping the dead body.

The Yamada style how to chop

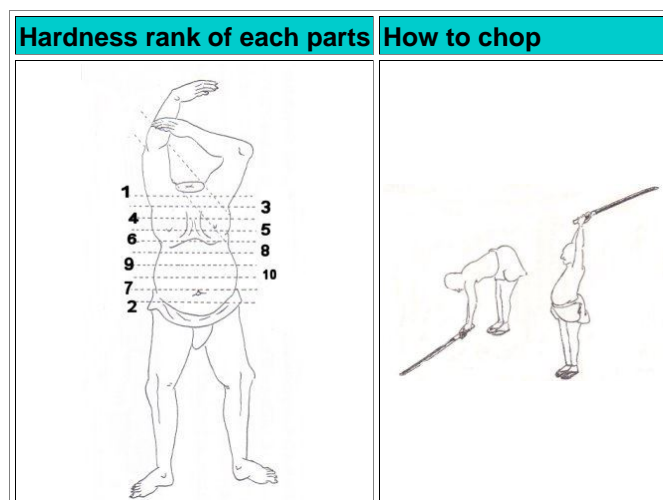


They had three types of method to judge how cut well the sword. They are "**Iki-dameshi**", "**Sinin-dameshi**", "**Katamono-dameshi**". "**Iki-dameshi**" was to chop a live man, "**Shinin-dameshi**" was to chop a dead body, and "**Katamono-dameshi**" was to chop a hard thing like iron. Yamada family judged by chopping dead body as mentioned above.

They put both hands up of a dead body and made it lie down between bamboo sticks on **Dodan** (above picture) and chop around the armpit of body. They used **particular Tsuka** (= heft) like above picture when they chop.

They named each part of a body, and the hardness is different for each part. I wrote the rank in order of the hardness. Please look at the picture below. Rank 1 is the most hard.

They held Tsuka with both fists put together (normally detach both fists). It is said that if they hold like this, they can get up speed when they swing a sword downward. And they open legs to the breadth of shoulders and true up legs. They never open in front and behind.. And they hold a sword high over their heads. When the sword to swing down comes above head, they stretch elbow and swing down like draw a circle. They do not aim at body but Dodan. After they chop a body, their body fall forward.



They chop at the part over rank4 (above picture) and classified.

Saijyou-Oowazamono

The sword cut off the part completely.

Oo-Wazamono

The sword cut off the part about 90%.

Yoki-Wazamono

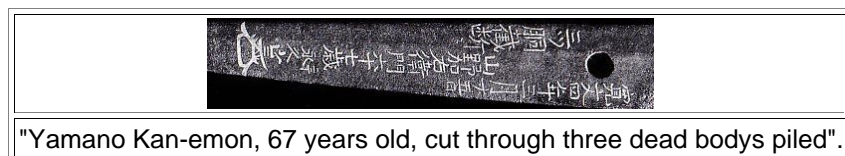
The sword cut off the part about 80%.

Wazamono

The sword cut off the part about 70%.

There are a lot of swords which engraved on Nakago (*the end piece inside the heft*) when and which parts the sword cut off. We call this **Saidan-Mei**. Please refer to "[Highlight of Japanese sword](#)" < Mei > " Saidan-Mei ".

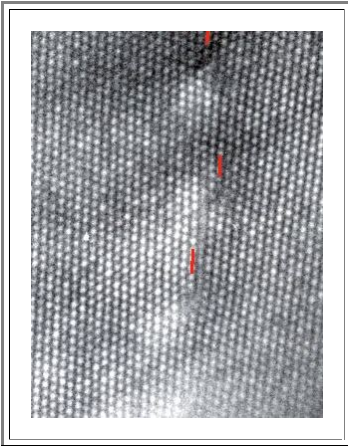
The engravement then may be like this:



Abbild von Stufenversetzungen mit Hilfe der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie (**HRTEM**)

Wir blicken direkt in einen Silizium Kristall bei ca. **30.000.000**-facher Vergrößerung

Illustration



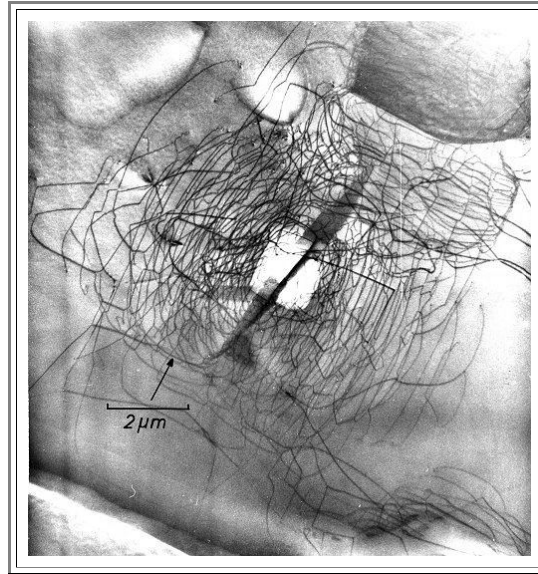
- Die vertikal verlaufenden Linien aus verwaschenen hellen Kreisen sind **{111}** Netzebenen des Kristalls, die Kreise entsprechen der Projektion von jeweils **2** Silizium Atomen (vergleiche die auf [Übungsaufgabe 3-6](#) aufbauende [Aufgabe 4-1](#)).
- Drei endende Netzebenen (rot markiert) sind deutlich sichtbar; das Bild entspricht ziemlich genau der [Zeichnung](#).
- Das ist, am Rande bemerkt, eines der allerersten hochauflösenden **TEM** Bilder überhaupt, das direkt Versetzungen zeigt. Es entstand **1979**, als das Siemens Elmiskop 102 (seeligen Angedenkens) erstmals erlaubte, **HRTEM** Bilder "routinemäßig" aufzunehmen.

Abbild eines Versetzungsknäuels in Silizium durch Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)

Illustration

Wir blicken direkt *durch* einen Silizium Kristall bei ca. **20.000**-facher Vergrößerung. In dem betrachteten Gebiet befindet sich (unsichtbar) der Emitter eines Transistors einer integrierten Schaltung.

- Die schwarzen Linien sind alle Versetzungen; sie bilden ein dichtes Knäuel (man muß sich das dreidimensional vorstellen)
- Das weiße "Quadrat" in der Mitte des Knäuels ist die Ursache für die Versetzungen: Dort wurde das **Si** mechanisch verletzt (durch zu hartes Aufsetzen einer Testspitze).
- Die schwarze "Doppelsichel" ist ein dadurch entstandener Mikroriß. Bei der Bearbeitung des Siliziums bei hohen Temperaturen diente dieser Mikroriß als Versetzungsquelle; unser ehemals versetzungsfreies **Si** hat jetzt lokal eine hohe Versetzungsdichte (Wie hoch etwa?). Es erübrigt sich, zu erwähnen, daß der Transistor, und damit die ganze integrierte Schaltung, natürlich nicht mehr funktioniert.

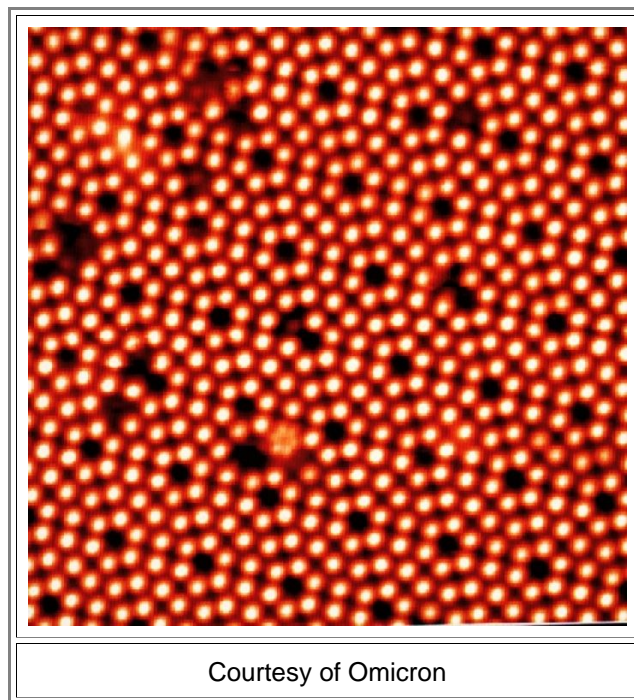


Silizium Oberfläche (abgebildet mit dem Rastertunnelmikroskop)

Illustration

Das Bild zeigt die **Si**-Oberfläche im Ultrahochvakuum, nach verhergehender Entfernung der dünnen, an Luft immer vorhandenen Oxidschicht. Ultrahochvakuum (**UHV**) ist nötig, damit die Probe nicht sofort wieder oxidiert. Einige ins Auge fallende Besonderheiten sind:

- Die **Atome** sind deutlich als rotumrandete (künstlich eingefärbte) Kreise sichtbar. Das Rastertunnelmikroskop (abgekürzt **STM**, nach der englischen Bezeichnung "**scanning tunneling microscope**") hat die höchste Auflösung aller Mikroskope und kann Atome auf den Oberflächen (elektrisch leitender) Körper ohne weiteres sichtbar machen.
- Die Oberfläche hat **keine** Ähnlichkeit mit einer **{111}** Ebene des Diamantgitters. Die Atome der Oberfläche (und die Lage darunter) haben sich **rearrangiert** um ihre freien Bindungen gegenseitig bestmöglichst abzusättigen. Die zweidimensionale Elementarzelle des Oberflächengitters ist ziemlich kompliziert mit einer Gitterkonstante die **7** mal größer ist als die Gitterkonstante des **Si** Volumengitters. Man spricht deshalb auch von der **7 x 7** Struktur der **{111}** Oberfläche.
- Der **7 x 7** Oberflächenkristall enthält seinerseits Defekte, insbesondere sind Leerstellen gut zu erkennen.
- Außerdem ist noch ein Sauerstoffatom an ein Oberflächen **Si**-Atom gebunden. Da es **6** äquivalente Positionen einnehmen kann, zwischen denen es schnell hin-und-herspringt, sieht das **STM** nur einen Mittelwert - es resultiert ein verschmiertes Sechseck (mal danach suchen).



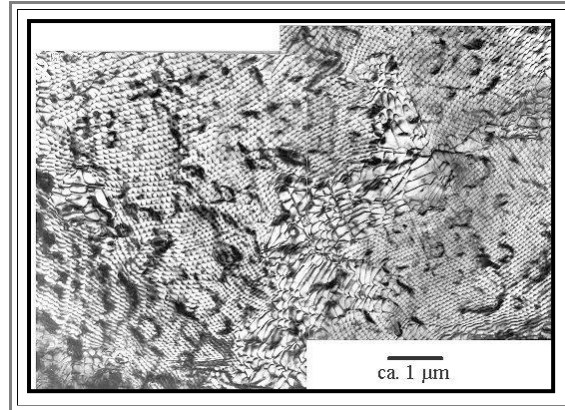
- I would love to give due credit to the people who took that magnificent picture, unfortunately I have no idea who they are - this picture just floats around.

Feinstruktur von Phasengrenzen

Illustration

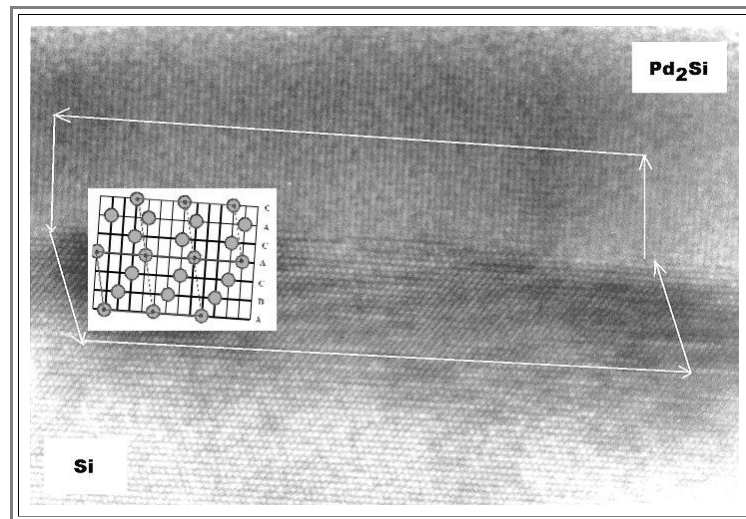
Hier sind zwei **TEM** Bilder, die an dieser Stelle nur illustrieren sollen, daß Phasengrenzen eine sehr komplexe Feinstruktur haben können.

- Das erste Bild zeigt die Phasengrenze zwischen einkristallinem Silizium und Nickeldisilizid; die **Si - NiSi₂** Phasengrenze in einer direkten Durchsicht (sichtbar sind nur die Strukturen in der Phasengrenze; die dünne Schicht **Si** oder **NiSi₂** über bzw. unterhalb der Phasengrenze ist unsichtbar).
- Hier stoßen zwei kubische Gitter mit verschiedener Basis und leicht verschiedenen Gitterkonstanten in derselben Kristallorientierung (hier **{111}**) "**epitaxial**" aufeinander. In der Phasengrenze bildet sich ein dichtes Netzwerk von sogenannten "**Misfit-Versetzungen**"; eindimensionalen Defekten mit Versetzungscharakter, die aber nur in der zweidimensionalen Phasengrenze definiert sind.



Das zweite Bild zeigt eine **HRTEM** Aufnahme der Phasengrenze **Si - PdSi₂**. Hier stößt das **kubische Si** - Gitter (unten; in **<110>** - Projektion) auf das **hexagonale** Gitter des **PdSi₂** (oben); ein einfaches Modell der Grenzfläche ist im Einsatz gezeigt.

- Obwohl die Atome fast sichtbar sind, bleibt die genaue Struktur der Phasengrenze in diesem Bild noch unklar. Mit weiteren Bildern läßt sich aber herausfinden, daß auch hier Misfit Versetzungen in sehr hoher Dichte in die Grenzfläche eingebaut sind.
- Mehr darüber findet sich im Hyperscript "Defects" unter [Phasengrenzen](#)

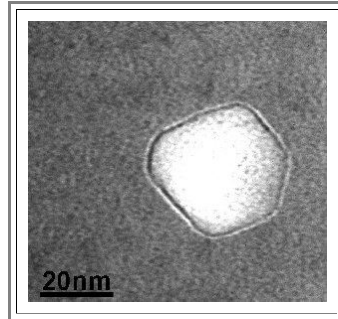


TEM Bilder eines Voids und eines Mikrorisses

Illustration

Hier ein **TEM** Bild eines recht kleinen Voids in **GaAs** (von W. Jäger).

- Es ist durch die Agglomeration von Leerstellen entstanden, die wiederum an der Diffusion von **Zn** Atomen im **GaAs** beteiligt waren.
- Das Void ist **facettiert**, d.h. nicht rund sondern mit relativ gut ausgeprägten ebenen Seitenflächen, die kristallographischen Ebenen mit kleiner Oberflächenenergie entsprechen.



Als nächstes ein Mikroriß im Silizium, entstanden durch Beschuß mit Wasserstoffatomen bei höheren Temperaturen (ca. **400 °C**).

- Die zunächst als interstitielle Fremdatome im Gitter herumwandernden **H** - Atome finden gelegentlich ein anderes **H** - Atom und reagieren unter großem Energiegewinn zu **H₂**.
- Die dadurch bedingte leichte Aufweitung des **Si** - Gitters wirkt auf andere **H** - Atome anziehend, so daß immer mehr **H** - Atome sich am gleichen Ort treffen und zu (dann unbeweglichem) **H₂** reagieren.
- Erst wenn der Druck in der entstehenden Wasserstoffblase sehr groß wird (einige hundert **MPa**), stoppt der Prozeß. Vorher reißt aber das **Si** - Gitter auf; es bildet sich ein lokaler Mikroriß.

Im linken Bild ist der Riß in sich geschlossen (man stelle sich ein geschlossenes Band vor), im rechten Bild liegt der Riß planar auf einer der **{111}** Ebene; er zieht sich (mit den gewählten Abbildungsbedingungen fast unsichtbar) in der linken Bildhälfte von oben nach unten.

- Bei diesem Exemplar waren die Spannungen im Gitter so groß, daß ein Netzwerk von Versetzungen (die dunklen Linien) erzeugt wurde und damit etwas plastische Verformung stattfand. Die "geschuppte" Struktur über das ganze Bild ist ein Artefakt der Probenpräparation und zeigt (unwichtige) Strukturen der Probenoberfläche.



TEM Bilder von Ausscheidungen

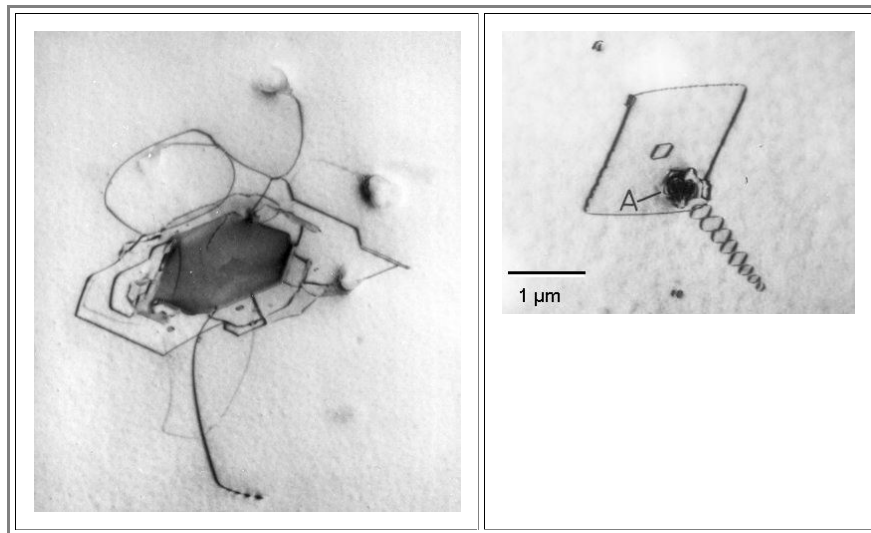
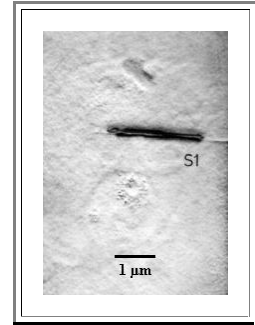
Illustration

Hier sind einige Ausscheidungen in in **Si**

- Das nebenstehende kleine Bild zeigt eine nadelförmige **FeSi₂** Ausscheidung; eine der "tödlichsten" Krankheiten von integrierten Schaltungen

Die beiden unteren Bilder zeigen Sauerstoffausscheidungen in **Si**, eine der vielen Formen von **SiO₂**.

- Das plättchenförmige **SiO₂** Teilchen paßt nicht so recht ins Gitter; es "drückt" kräftig und produziert damit hohe lokale mechanische Spannungen. Das **Si** Gitter reagiert darauf mit plastischer Verformung, d.h. es werden Versetzungen gebildet, die ins Gitter laufen und die Spannungen abbauen.
- Das rechte Bild (Ausscheidung bei "A") zeigt, daß diese Versetzungsbildung offenbar sehr regelmäßig ablaufen kann; wir sehen eine ganze Sequenz von Versetzungsringen.



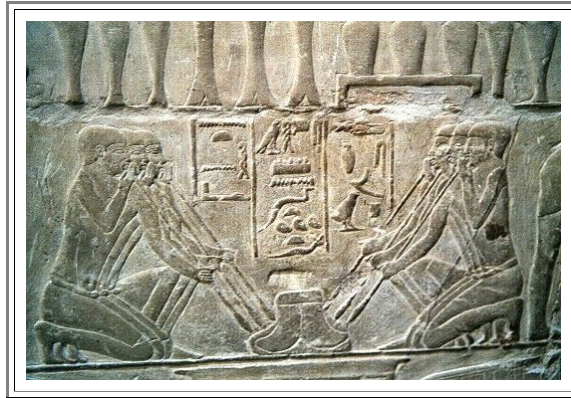
Egyptian Gold Smiths

Illustration

Hier ein passender [Originalmodul](#) aus dem Hyperscript "Defects"

Here is a picture (a relief, actually) from a mastaba in **Sakkara**, the necropolis of the early (and later) pharaohs and their underlings. It is about **4500** years old and shows how to raise the temperature of a fire.

- It is a bit blurry, because it is dark in there and flashes are not allowed. In consequence, three out of the roughly ten words every Egyptian custodian or guardian seems to know are: "Flash no problem" - always uttered with a stretched out hand (palm up). However, being a scientist who knows what light can do to pigments over time, I kept my money and tried to live with highly sensitive film (another triumph of point defect and crystal engineering) and long exposure times.
- This picture was originally painted; but only traces of the colors are left by now.



Mythen der Schmiede

Illustration

Wer kennt nicht einige Mythen aus Märchen und Heldensagen, die sich um die Schmiedekunst und Schmiede ranken. Nachfolgend einige besonders tolle Geschichten.

Damaszenerklingen waren sehr wertvoll; ihre Herstellung erfordert besondere Sorgfalt; auch und insbesondere bei den Temper- und Abschreckprozessen. Überliefert ist folgendes Rezept (frei übersetzt):

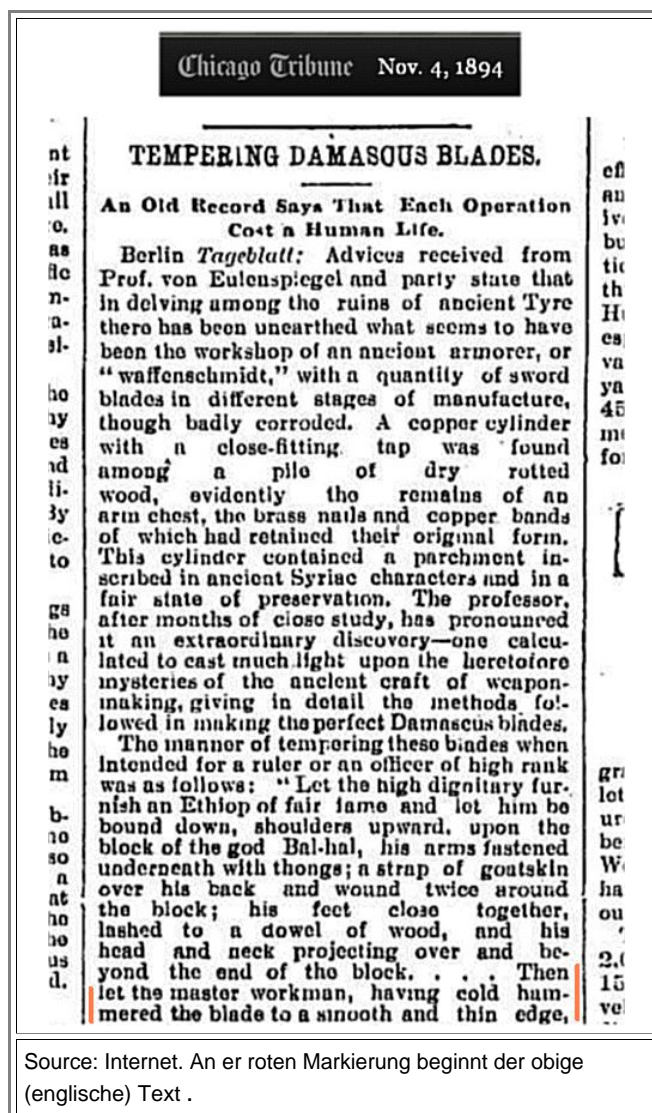
● *Dann stößt der Meisterschmied, nachdem er der Klinge durch Hämmern eine scharfe und gerade Schneide verliehen hat, das Schwert in ein Feuer von Zedernholzkohle, hinein und wieder heraus, während er das Gebet zu Baal rezitiert, bis der Stahl die rote Farbe der aufgehenden Sonne angenommen hat, so wie sie bei Sonnenaufgang über der Wüste gen Osten erscheint, um dann mit einer schnellen Bewegung den Stahl von der Spitze bis zum Haft sechsmal durch die fleischreichsten Teile des Rückens und der Oberschenkel eines Sklaven zu stoßen, bis die Farbe dem königlichen Purpur gleicht. Dann, falls das Schwert mit einem Streich und einem Schlag des rechten Armes des Meisters den Kopf des Sklavens ohne Scharte oder Riß vom Rumpf getrennt hat, und die Klinge um den Körper eines Mannes gebogen werden kann ohne sich zu verbiegen, mag das Schwert als perfekt gelten und dem Dienste des Gottes Baal geweiht werden.*
(Übersetzt aus dem Buch von [S. Sass](#)).

● Man kann spekulieren, daß diese Prozedur die Härtung der Schneide verbesserte (durch **C**- und **N**-Eintrag in die obersten Schichten), aber experimentellen Untersuchungen sind heute (glücklicherweise) enge Grenzen gesetzt.

Diese grausame Geschichte hat bei allen, die and der Geschichte von Eisen, Stahl und Schwertern interessiert sind, einige Aufregung verursacht. Sie wird immer wieder hervorgekramt und in allen möglichen Beiträgen verwendet. Deshalb mal ganz groß:

**Die obige Geschichte ist frei erfunden
und
auch technisch Blödsinn! Ich
entschuldige
mich dafür, darauf hereingefallen zu
sein.**

Ich habe das erst jetzt (10. Feb. 2015) durch Glück und Zufall herausgefunden. Der Ursprung der Geschichte im Englischsprachigen Raum ist hier:



Jeder Deutschsprachige weiß jetzt was passiert ist. Das Berliner Tageblatt hat sich vor 121 Jahren entweder einen kleinen (April?) Scherz erlaubt, oder eine kleine Satire gegen irgendwelche damaligen Sensationsarchäologen oder Schwertfanatiker geschrieben. Prof. von Eulenspiegel! Mehr braucht's eigentlich nicht. Dass man auch per Text- und Technikanalyse zwingend zum Schluss kommt, dass das Ganze nicht stimmen kann, wird im "Iron, Steel and Swords" Hyperskript im Detail erläutert.

Zu dem was weiter unten folgt, könnte man auch noch einiges anmerken; im Wesentlichen ist es aber korrekt.

Wieland der Schmied, eine altgermanische Sagengestalt, stellte unübertroffene Schwerter her, die in Stärke und Schärfe nicht ihresgleichen hatten. Sein Geheimrezept (übernommen aus [R. Hummels Buch](#)) ging folgendermaßen:

Ein Stück Eisen wird mit einer Feile zu einem grobem Pulver zerraspelt und den Hühnern unters Futter gemischt. Aus der Hühnerscheiße wird es wieder extrahiert. Nach einigen Durchgängen durch die "Mastvögel" wurde daraus ein Schwert geschmiedet, das im kritischen Finale eines großen Schmiedewettkampfs überlegen siegte, indem es den Mitbewerber (der in voller Rüstung war) in zwei Hälften schnitt.

Der Link hat das im [Original](#), d.h. in der Nachdichtung von Karl Simrock

Bei **Umland** wird daraus: "zur Rechten sieht man wie zur Linken, einen halben Türken heruntersinken".

Das Rezept funktioniert übrigens; 1930 hat es ein deutscher Metallurge ausprobiert (allerdings mit Labormessungen): Die Hühnerverdauung ersetzte Überschußkohlenstoff durch Stickstoff, im Gesamteffekt wird daraus etwas stahlähnliches.

In einem **Alchemistenbuch aus Nürnberg** von 1532 ("Von Stahel und Eysen") sind einige hübsche Rezepte zur Qualitätsverbesserung von Schwertern angeführt. Zum Beispiel zum **Härten**:

Nimm Stengel und Blätter von Verbenen, zerstoße sie, und drücke den Saft durch ein Tuch. Gib eine gleichgroße Menge von Männerpisse dazu, und etwas von dem Saft den man aus Käfermaden gewinnt. Laß das Eisen nicht zu heiß werden sondern halte Maß. Laß es abkühlen, bis es goldene Flecken zeigt, dann kühle es zur Gänze in dem Gebräu. Wenn es sehr blau wird, ist es noch zu weich.

Einfacher geht's wie folgt:

- *Nimm geklärten Honig, frische Pisse vom Ziegenbock, Alaun, Borax und Salz; mische es gut und schrecke das Schwert darin ab.*

● **Urin** funktioniert wirklich bis zu einem gewissen Grad: der darin enthaltene Harnstoff (HNCONH_2) kann tatsächlich zu einer heute verstandenen "Stickstoffhärtung" führen.

➤ Bessere Rezepte zum **Abschrecken** erforderten einen etwas größeren Aufwand beim Sammeln der Zutaten:

- *Nimm Harzöl, Drachenblut, Hornspäne, die halbe Menge Salz, Saft vom Erdwurm, Rettichsaft, Talg und Verbenen und kühle das heiße Schwert in dieser Mixtur. Diese Härtung wirkt besser, wenn das Werkstück zuerst gründlich gereinigt und poliert wird.*

● Das Blöde war nur, daß man zum Drachenblut sammeln schon ein ziemlich gutes Schwert brauchte!

➤ Tat man beim Härten zuviel des Guten, gab es auch das Rezept zum **Enthärten**:

- *Laß Menschenblut gut abstehen, bis sich oben Wasser bildet. Schöpfe dieses Wasser ab und behalte es. Dann erhitze die harten Stücke und bestreiche sie mit einer Feder, die in dieses Wasser getaucht wurde. Die Stücke werden das Wasser verschlingen und weich werden.*

➤ Wir sehen: Auch damals hatten die wiss. Mitarbeiter nicht immer ein leichtes Leben; z.B. beim Drachenblut sammeln oder wenn der Meister mal gerade kein Menschenblut zur Hand hatte, und der Kunde unbedingt ganz schnell sein Schwert etwas aufgeweicht haben mußte! Der Personalrat war nämlich noch nicht erfunden.

➤ Wie man Eisen **wirklich** "hart" oder "weich" macht, ist im Modul "[Stahl](#)" behandelt.

Uhlands Gedicht


- Uhlands Gedicht "Der wackere Schwabe" enthält wohl das bekannteste Beispiel für eine gespaltene Persönlichkeit.
- Uhland wird wohl die [Amelungensaga](#) gekannt haben, in der Wieland der Schmied seine Heldentaten vollbringt.
- Aber das Motiv ist auch in anderen Dichtungen verarbeitet, und kommt manchmal ganz unverhofft hoch, z.B. bei [Arno Schmidt](#)


Illustration

- Hier der komplette Text des **Uhland** Gedichts:
Der wackere Schwabe

- Als Kaiser Rotbart lobesam
zum heil'gen Land gezogen kam,
da mußte er mit dem frommen Heer
durch ein Gebirge wüst und leer.
Dasselbst erhob sich große Not,
viel Steine gab's und wenig Brot,
und mancher deutsche Reitersmann
hat dort den Trunk sich abgetan;
den Pferden war's so schwer im Magen,
fast mußte der Reiter die Mähre tragen.
- Nun war ein Herr aus Schwabenland,
von hohem Wuchs und starker Hand,
des Rößlein war so krank und schwach,
er zog es nur am Zaume nach;
er hätt' es nimmer aufgegeben,
und kostet's ihn das eigne Leben.
So blieb er bald ein gutes Stück
hinter dem Heereszug zurück;
da sprengten plötzlich in die Quer
fünzig türkische Ritter daher.
- Die huben an auf ihn zu schießen,
nach ihm zu werfen mit den Speissen.
Der wackre Schwabe forcht sich nit,
ging seines Weges Schritt vor Schritt,
ließ sich den Schild mit Pfeilen spicken
und tät nur spöttisch um sich blicken,
bis einer, dem die Zeit zu lang,
auf ihn den krummen Säbel schwang.
- Da wallt dem Deutschen auch sein Blut,
er trifft des Türken Pferd so gut,
er haut ihm ab mit einem Streich
die beiden Vorderfüß' zugleich.
Als er das Tier zu Fall gebracht,
da faßt er erst sein Schwert mit Macht,
er schwingt es auf des Reiters Kopf,
haut durch bis auf den Sattelknopf,
haut auch den Sattel noch zu Stücken
und tief noch in des Pferdes Rücken;
**zur Rechten sieht man wie zur Linken,
einen halben Türken heruntersinken.**
- Da packt die andern kalter Graus;
sie fliehen in alle Welt hinaus,
und jedem ist's, als würd' ihm mitten
durch Kopf und Leib hindurchgeschnitten.
Drauf kam des Wegs 'ne Christenschar,
die auch zurückgeblieben war;
die sahen nun mit gutem Bedacht,
was Arbeit unser Held gemacht.
Von denen hat's der Kaiser vernommen.
Der ließ den Schwaben vor sich kommen;
er sprach: »Sag an, mein Ritter wert!

Wer hat dich solche Streich' gelehrt?«
Der Held bedacht sich nicht zu lang:
»Die Streiche sind bei uns im Schwang;
sie sind bekannt im ganzen Reiche,
man nennt sie halt nur **Schwabenstreiche**.

 Hier die Arno Schmidt Variante

 "Langmichel Grinsemaul flätzte mir das Diner auf den Tisch (ich spaltete ihm in Gedanken den Kopf, sodaß ihm die Hälften auf beiden Schultern lagen : ? - Aber er gewann auch dadurch nicht; fügte ich ihm also den Kopf wieder zusammen."

Wieland der Schmied

Illustration

Nachfolgend die relevanten Teile aus "**Wieland der Schmied**" (in der Interpretation von Simrock), die wiederum zu dem "**Amelungenlied**" gehören.

- **Wagner** hat für den "**Siegfried**" im übrigen mehr aus diesem Epos entnommen, als aus dem eigentlichen **Nibelungenlied**.
- Auch der aus **Schillers** "**Wilhelm Tell**" allseits bekannte Apfelschuss findet sich hier schon schon - aber gute **1000** Jahre früher.

Wieland hält sich unerkant am Hofe von König Neiding auf, dessen Krieger seine Familie ausgelöscht haben. Mit dem Hofschmied **Amilias** kommt eine Wette zustande: Amilias wird sich eine Rüstung schmieden, Wieland (unter dem Pseudonym **Goldbrand**) ein Schwert. Kann er damit die Rüstung nicht bezwingen, gehört sein Haupt Amilias.

Zunächst zum Schmieden des Schwertes "**Mimung**". Es ist eigentlich schon fertig, aber Wieland findet es nicht scharf genug:

- Da ging zu seinem Saale der König wohlgemut.
Wieland in der Schmiede nahm eine Feile gut;
Damit ward zerfeilet das Schwert zu eitel Staub:
Wer es vernommen hätte, die Ohren wären ihm taub.

Geworden von der Feile Geschrill auf hartem Stahl;
Auch hätt' ihn wohl gedauert des guten Schwertes Qual.
Da lagen nun die Späne: die schlug der weise Schmied
Mit Mehl und Milch zusammen: der Teig ihm trefflich geriet.

Dann nahm er Mastvögel, die schon den dritten Tag
Auf Kost umsonst gelauert im engen Gitterhag,
Und warf die schwere Speise den Hungerleidern vor
Da fraßen sie gewaltig, nicht hat begieriger Thor

Noch tapferer eingehauen, als er für Freia galt
Und Thyrmur der Riese die Braut gefräßig schalt:
Man sah in kurzer Stunde den ganzen Trog geleert
Und einen anderen rückseits am Morgen doppelt beschwert.

Des letztern Inhalt brachte der Meister in die Glut:
Das Erz daraus zu schmelzen schürt' er das Feuer gut,
Schöpfte dann aus dem Kessel, was da von Unrat war,
Und gewann ein Eisen endlich von Schlacken lauter und klar.

Als sich das erkühlte, da schuf der Degen wert
Vor dem siebten Tage ein meisterliches Schwert:
Das war erst scharf und schneidig, das war erst fest und hart,
Wie auf Erden schwerlich, ein bess'res gesehen ward.

Aber Wieland ist es immer noch nicht scharf genug; die Prozedur wird wiederholt. Dann endlich ist **Mimung** fertig. Ein Flöckchen Wolle, das träge einen Bach heruntertreibt, wird am Schwert durchschnitten.

Der Wettkampf beginnt:

- Noch saß auf dem Steine der Schmied Amilias
Wie auf dem Königsstuhle und brüstete sich baß;
Den Kreis umher bestrahlten die Waffen spiegelblank.
Da stellt mit dem Schwerte sich Goldbrand hinter die Bank.


Legte Mimungs Schneide auf des Helmes Hut
Und drückte leise, leise: "Nun sage, wie es tut,
Wenn du etwas spürest." Da sprach Amilias:
"Hau zu aus allen Kräften, laß Zorn dir helfen und Haß,


Du wirst sie wohl bedürfen, eh' es den Helm versehrt."
Da drückte Goldbrand stärker und stärker auf das Schwert:
Helm und Haupt durchfuhr es, den Panzer und den Bauch
Und fuhr bis auf den Gürtel und durch die Eisenhosen auch.


Da fragte Goldbrand wieder: "Nun sprich wie es tut."
 Amilias versetzte: "Mir ist wie dem zumut,
 Dem kalt ein Tropfen Wasser niederrinnt den Leib:
 Ich wähne gar du machst dir hier unnützen Zeitvertreib."

Goldbrand entgegnete: "So schüttle dich einmal.
 Du hast den letzten Becher getrunken heut' im Saal."
 Nun schüttelte sich mächtig der Schmied Amilias:
 Da fiel zu beiden Seiten ein halber Ritter ins Gras.

In den spiegelblanken Waffen mitten durchgeteilt
 Wie hat ihn da die Strafe der Hochfahrt ereilt!
 Aus beiden Stücken strömte des Blutes roter Schwall:
 Ein Schrei entfuhr Bathilden und ihrer Jungfrauen all.

 Bathilde, des Königs Töchterlein, hatte im übrigen den Zauberring erhalten, den Wieland seiner Frau Elfenweiß abgenommen hatte, die dann von König Neidings Kriegern umgebracht wurde. Elfenweiß war im übrigen eine Schildjungfrau (so eine Walkürenabart) und wurde seine Frau per Gefangennahme (d.h. Vergewaltigung). Bathilde wird dann auch die Mutter seines Sohnes Wittich, auch per Vergewaltigung:

-  Da hat er seinen Willen, sie wehrte sich nicht mehr:
 da er das Magdtum raubte, das Mägdlein weinte sehr;

 Ja so war'ns halt, die alten Rittersleut'. So richtige Vorbilder für die deutsche Jugend, wie im Vorwort angemerkt.

Kanonen, Blut und Energieerhaltung

Benjamin Thomson, bekannt als Graf Rumford

Illustration

Graf **Rumford**, eigentlich Benjamin Thomson, war ein rechter Abenteurer, der sich in mancherlei Hinsicht verewigt hat: Er hat die "Royal Institution" gegründet, soziale Institutionen ins Leben gerufen und eine staatliche Arbeitsvermittlung organisiert - außerdem ist die "**Rumford Suppe**" nach ihm benannt. Seine wissenschaftliche Arbeiten sind in München entstanden, wo er den bayrischen König beriet und Leiter des Militärarsenals war.

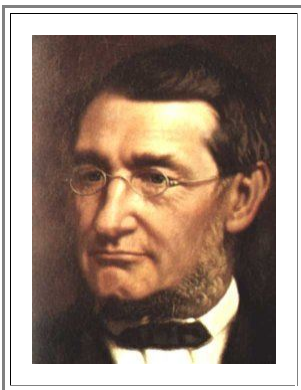
- Insbesondere versuchte er die "Wärmesubstanz", an die man damals glaubte, zu wiegen - es ist ihm nicht gelungen. Aber er stellt doch fest, daß die Wärmesubstanz, falls es sie geben sollte, ein verschwindend kleines Gewicht haben muß.
- Seine große Tat war, daß er so um **1798 - 99** der "Wärmesubstanztheorie" an **einer** Stelle den Todesstoß versetzte. Und zwar wies er nach, daß die beim Aufbohren von **Kanonenrohren** entstehenden Wärmeerscheinungen **quantitativ** beschrieben werden konnten (z.B. dadurch, daß die in einem Körper entstehende Wärmemenge der Dauer der Reibungseinwirkung proportional war und nicht - wie bei einer "Substanz" - mengenmäßig begrenzt).
- Er war dicht davor, das **mechanische Wärmeäquivalent** zu entdecken - aus seinen Versuchsprotokollen läßt es sich recht genau nachträglich ermitteln.

Es hat aber nicht geklappt - seine vorsichtigen Interpretationen stießen auf Skepsis der Fachkollegen. Während seine Ergebnisse zwar nicht angezweifelt wurden, hat man viel Zeit und Energie darauf verwendet, sie im Rahmen der "Wärmesubstanztheorie" zu deuten. Es war damals nicht anders als heute.

- Es mußten aber noch ca. **40** Jahre vergehen, bis der Energieerhaltungssatz in seiner vollen Bedeutung erkannt wurde. Die entscheidenden Namen dazu sind: **Julius Robert Mayer**, **James Prescott Joules** und **Hermann von Helmholtz**.

Robert Mayer (1814-1878)

"D'r närrisch Mayer" nannten ihn die Heilbronner Kinder in den 1850er Jahren. Und doch ist er der größte Sohn der Stadt. Und schließlich hatte er einen guten Grund, narrisch zu werden. Aber von vorne.



- Julius Robert Mayer** wurde am **25.11.1814** in Heilbronn geboren. Als **28**jähriger Sanitätsoffizier an Bord eines Handelsschiffes macht er eine Entdeckung, die in die Geschichte der Physik eingegangen ist. Über das Nachdenken von verschiedenen Blutfärbungen an verschiedenen Orten kommt er auf den Gedanken, daß Wärme und Bewegung keine gänzlich verschiedenen Erscheinungen sind, sondern beide eine Form von Energie darstellten.
- Als erster stellt der junge Arzt fest, daß Energie nicht erzeugt oder verbraucht, sondern nur in eine andere Form umgewandelt werden kann. So weit so gut, doch wie jeder heute im Physikunterricht lernt, wird Wärmeenergie nicht in "Mayer", sondern in "Joule" angegeben. Benannt ist die Einheit nach dem englischen Physiker James Prescott Joule, der fünf Jahre später unabhängig von Mayer zu derselben Erkenntnis gelangt war. Fortan galt er als der Entdecker des Energieerhaltungssatzes.
- Der Streit um die "Erstgeburtsrechte" machte Mayer schwer zu schaffen. In einem Nervenzusammenbruch springt er im Frühjahr **1850** aus dem **2.** Stockwerk seines Hauses. Nach Kuraufenthalt in Wildbad wurde er **1851** entlassen, aber gleichzeitig von einer geistigen Störung befallen. Nach Aufenthalt in Heilanstalten kehrte er **1853** nach Heilbronn zurück. Ab **1858** ging es mit dem närrischen Mayer dann wieder bergauf: Ehrungen verschiedener Universitäten, sogar die Erhebung in den persönlichen Adel ("von Mayer") trugen seiner Verdienste Rechnung. Er starb am **20. März 1878** in seiner Heimatstadt. Sein Denkmal befindet sich, nach zeitweiser Verlagerung in den Stadtgarten, wieder am ursprünglichen, ihm gebührenden Ort: auf dem Marktplatz.

Soweit der Text auf den Internetseiten seiner Geburtsstadt **Heilbronn**. Wie kommt nun ein junger Arzt zum Energierhaltungssatz?

- Als Schiffsarzt war ihm aufgefallen, daß das **venöse** Blut der Matrosen in den Tropen eine hellere Färbung aufwies als im kälteren Heilbronn. Er hat daraus mit einiger Genialität geschlossen, daß bei hohen Temperaturen der Oxidationsprozeß im Blut weniger intensiv abläuft, weil ein Teil der vom Körper benötigten Wärme von der Umgebung bereitgestellt wird.
- Seine darauf begründete Arbeit "**Bemerkungen über die Kräfte der unbelebten Natur**" wurde von den renommierten "Annalen der Physik" erst mal abgelehnt - nicht ganz zu Unrecht, denn die Arbeit war voll von fragwürdigen philosophischen Begründungen.
- Letztlich postulierte er aber **1842** als erster die Äquivalenz von Wärme und Bewegung und gab einen relativ guten Zahlenwert für das mechanische Wärmeäquivalent an (**360 kpm** statt **425 kpm**; **kp** = kilopond) - wenn auch mit fragwürdigen Begründungen.

Sein größter Gegner, der ihn auch wissenschaftlich weit überstrahlte, war, wie von den Heilbronnern Stadtvätern angemerkt, **James Prescott Joule**.

James Prescott Joule

In den Worten englischer Internetseiten:

- James Prescott Joule** was the fourth born son to Benjamin and Alice Joule on Dec **24, 1818** in Salford, Great Britain. The first two boys the Joule's had both died in infancy. The thirdborn child was James' brother Benjamin (b. **1817**) named after his father. James was followed by two sisters Alice (b. **1820**) who died at the age of **14** and Mary (b. **1823**). He also had a younger brother John (b. **1824**).
James' father Benjamin, was a wealthy man who established a **brewery** in Manchester near a prison begun by John Howard (as in the John Howard Society).
James spent much of his childhood (ages **5 - 12**) in ill health due to a spinal weakness however through some unorthodox procedures by the brothers Taylor, who started their careers as horse doctors, James improved such that most of his youth he was fairly well. The illness had a greater impact on James psychologically, making him quite shy and unassertive when in the presence of others. James and his brother Benjamin were quite close though out their early lives. James did not receive a "normal" schooling, instead he and his brother Benjamin were tutored at home by a series of tutors culminating with **John Dalton**. Indications are that much of James' education was self administered.
- EARLY INTERESTS:**
James' early influences included an interest in trains (steam engines) as well as the steam powered devices of his father's brewery. He had a boyhood interest in steam locomotives which may have sparked his interest in the field of thermodynamics. Ironically, Joule was involved in a train accident himself in which three people were killed.
The brothers Joule took an interest in phenomena such as lightning and the aurora borealis which they discussed at length with their tutor John Dalton. The boys also "sounded" or measured the depth of Lake Windemere to be **198** feet (today known to be **220** feet). James lost his father's cavalry pistol while investigating an echo in the mountains. This was not his only encounter with weapons, on another occasion he accidentally blew off his eyebrows.
James also had a somewhat scary disregard for the servants' health at the Joule residence. He carried out a series of tests on a servant girl giving her a series of shocks until ultimately she lost consciousness. James decided that this would be an appropriate point to conclude his experiment. (Lucky for the servant girl.)
Although James did work at his father's brewery his interest lied in experimentation which at first was spontaneous in nature. John Dalton who instilled in James the need to be a meticulous experimenter. Dalton did little more than teach the Joule boys arithmetic and geometry however he did introduce the boys to chemistry as was James' father's intention. Dalton insisted on following a careful procedure and becoming very skilled in the use of laboratory equipment.
James went on to be a much more renowned experimenter than his mentor, combining skill, originality and ingenuity. For example, James constructed instruments of measurement of a precise degree of accuracy, for the time in which he lived. Even by today's standards these instruments would be considered quite accurate. He was quite adept at balancing theoretical speculation and careful experimentation.
- JOULE'S SERIOUS WORK**
One of Joule's early interests was in the field of electricity. He was interested in improving the electric motor by making the electromagnet and batteries more efficient. As a result of his experimentation Joule discovered that the power of the engine was proportional to the product of the current and the emf (battery intensity).
Joule eventually gave up on this line of experimentation since the steam engine of the day was much more economical. Joule still felt that the electric motor would someday replace the steam engine. It was after he reached this impasse with the motor that Joule turned his attention to the relationship between electricity and heat.
Much of Joule's work took place between **1837** and **1847**. During this time Joule along with **Hermann von Helmholtz**, **Julius von Mayer** and Lord **Kelvin** established the principle of conservation of energy which states

that energy used up in one form reappears in another form and is never lost.

One of his more serious experiments led to the following result: The amount of heat produced by an electrical current is proportional to the product of the resistance of the wire and the square of the current. (das war **1845**) Joule had a major association with **William Thomson** (nicht der o.g. Graf Rumford oder Benjamin Thomson, sondern einer der vielen anderen Thomsons, die in der Physik noch bekannt sind) in which each helped the other refine their ideas.

It appears from the readings that Joule was the better of the two experimenters in both the construction of lab equipment, execution of the experiment and in the theoretical side of the experiments. However the combination of minds led to greater accomplishments than had they not worked together. As a result of their collaborative efforts they determined that when a gas expands without performing work, its temperature falls. This became known as the Joule - Thomson effect and its application was paramount to refrigeration technology.

This collaboration of minds on research in a particular area was quite new and different to the research practices of the day. Early on in his career he was criticized for drawing conclusions based on his work that were not completely justified by his workings. Joule took these criticisms to heart and although he was noted for his experimental precision, he was also known to be cautious about making speculations about the meaning of his results.

The last two years of Joule's life were spent mainly in his house where he spent the majority of his time reading. On Oct. 11th, **1889** Joule succumbed to his illness, a form of degeneration of the brain. As was the case of his life, he was honored for his achievements. His contributions in the field of thermodynamics were great and influential to the future developments in the field.













- Seine Arbeiten wären aber wohl doch auch erst mal untergegangen, wenn nicht der berühmteste Physiker der damaligen Zeit auf ihn aufmerksam geworden wäre, nämlich **Lord Kelvin**, der oben nur beiläufig erwähnte frühere **William Thomson**.

Der Weg vom mechanischen Wärmeäquivalent zu einer **stringenten Formulierung des 1. Hauptsatzes als Energieerhaltungssatz** war dann **Hermann von Helmholtz** vorbehalten, einem der auch heute noch bekannten berühmten deutschen Physiker.

- **1847** veröffentlichte er die Arbeit "**Über die Erhaltung der Kraft**" (Die heutige Energie hieß damals Kraft); dort ist zum ersten mal der Energieerhaltungssatz in voller Breite und Tiefe beschrieben.

Bücher zur Thermodynamik

Advanced

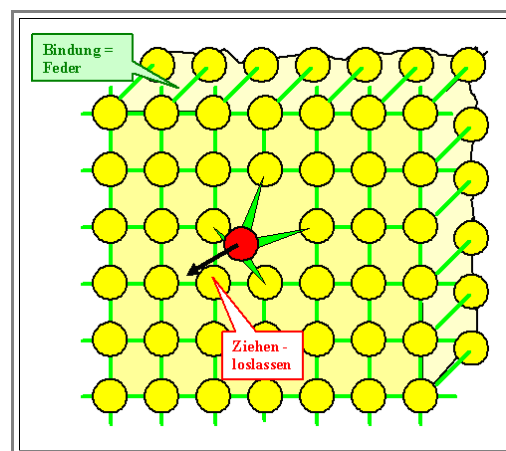
-  Es gibt zahllose Bücher zur Thermodynamik. Ausnahmslos beginnen sie aber immer mit der klassisch-phänomenologischen Thermodynamik, da die statistische Betrachtungsweise als schwer gilt.
 -  In Hyperskript haben wir die Verhältnisse umgedreht, und die statistische Thermodynamik in den Vordergrund geschoben.
 -  Allerdings nur einen ganz kleinen Teil, denn in voller Schönheit ist die statistische Thermodynamik tatsächlich nicht ganz leicht.
-  Damit gibt es keine Lehrbücher, die genau zum Hyperskript passen. Die nachfolgenden Bücher sind aber grundsätzlich geeignet.
 -  **Atkins: Physikalische Chemie**
 -  Der "Klassiker", in mehreren Auflagen (sowohl Englisch als auch Deutsch)
 -  Sehr umfangreich, aber gut lesebar. Gelegentliche Schwächen (z.B. kommt der Zentralbegriff "Massenwirkungsgesetz" im Stichwortverzeichnis nicht vor).
 -  **Wedler: Lehrbuch der Physikalischen Chemie**
 -  Das Gegenstück (und gelegentlich Kontrastprogramm) zum "Atkins".
 -  **Gerthsen: Experimentalphysik**
 -  Vergleichsweise kurz und knackig; gute Einführung in die statistische TD.
 -  Oft die "physikalische Sichtweise" durch Rückführung stehender Begriff der phys. Chem. auf allgemeinere physikalische Grundsätze (Beispiel: Nernst-Gleichung = Boltzmann Verteilung).

Kittel, Kroemer: Thermal Physics

Reibung im Atomaren und Energiedissipation

Illustration

- **Reibung**, oder besser **Energiedissipation**, ist wichtig für die Art der Gleichgewichte, über die wir hier nachdenken. Denn nur durch Reibung ist dafür gesorgt, dass sich nach einiger Zeit in *klassischen* Systemen *nichts mehr bewegt*.
- Ohne Reibung würde der im Hauptstrang gezeigte Massenpunkt in einem Potentialtopf für immer hin-und-herschwingen.
- Betrachten wir *nur* diese Schwingung, wäre der Massenpunkt dann auch im Gleichgewicht - es ändert sich schwingungsmäßig dann ja nichts mehr. Aber der Begriff "Gleichgewicht" ist nur für (statistische) *Systeme* sinnvoll, und sobald der Massenpunkt nicht mehr ideal isoliert ist kommt Reibung dazu; Gleichgewicht wird dann "Ruhe" (für den Massenpunkt) sein.
- Wie auch immer, bei klassischen Systemen haben wir *immer* Reibung, und ein statisches Gleichgewicht ist sinnvoll, leicht vorstellbar und fast ohne begriffliche Probleme. Das "fast" bezieht sich auf die Frage: Wo ist jetzt eigentlich die Energie, die in der Schwingung steckt?
- Wie ist das nun im Atomaren? Gibt es zwischen den **O₂** und **N₂** Molekülen in der Luft, die uns umgibt, so was wie Reibung im klassischen Sinn? An was und wie "reibt" sich unser im Potentialtopf schwingendes Atom?
- Gottseidank gibt es die klassische Reibung im Atomaren nicht! Denn dann würden nach einiger Zeit alle Moleküle ruhig am Boden liegen. Man muß sich nur mal eine Art von dreidimensionalem Flipper mit vielen Kugeln gleichzeitig vorstellen, um das sofort zu sehen.
- Wir nehmen einfach mal zur Kenntnis: *Es gibt im Atomaren keine Reibung im klassischen Sinne!*
- Das ist einfach zu sehen: Reibung im *klassischen* Sinne hieße z.B., dass ein im Potentialtopf der Bindung schwingendes Atom eine Kraft \underline{F}_R erführe, die mit negativem Vorzeichen proportional zu seiner momentanen Geschwindigkeit \underline{v} wäre; $\underline{F}_R = -k_R \cdot \underline{v}$.
- Das kann und darf nicht sein, denn dann würde die Amplitude und damit die Energie kontinuierlich abnehmen - sie muss aber irgendwie gequantelt sein. Außerdem woher soll diese Kraft denn kommen? Es gibt nur die Bindungsnachbarn, und die produzieren keine ominöse Reibungskraft. Und wo bleibt die Energie?
- Reibung im *klassischen* Sinne bewirkt immer nur eines: Energie, die in einer *geordneten* Bewegung steckt, wird aus diesem System "irgendwie" herausgezuzzelt und der "Umgebung" als Wärme, d.h. als *ungeordnete* kinetische Energie zugeführt. Reibung ist in diesem Sinne ein Energietransformator, ein Gleichmacher, ein Entropieerzeuger.
- Das ist das allgemeine Phänomen der *Energiedissipation* - und klassisch äußert sich das dann als Reibung.
- Wie das atomar funktioniert ist im Grunde einfach zu sehen. Wir lassen mal gedanklich einen Kristall über einen anderen gleiten - d.h. ein Körper rutscht auf einem anderen herum.
- Klassisch werden wir Reibung erfahren; wir schauen aber mal bei sehr hoher "Vergrößerung" was wirklich passiert.
- Solange die beiden Kristalle nicht so fest aufeinandergedrückt werden, dass bei einer Relativbewegung plastische Verformung oder gar (mikroskopischer) Bruch erfolgt, können bestenfalls die Atome der Randschicht, die von den Atomen des anderen Kristalls "angezogen" werden, bei einer Relativbewegung etwas aus ihrem Gleichgewichtsabstand ausgelenkt werden. Aber früher oder später "schnalzen" sie zurück. Das sieht dann stark vereinfacht so aus:



- Es ist unmittelbar klar, was geschieht wenn das herausgegriffene Atom "zuückschnalzt": nach kürzere Zeit wackeln alle Atome, die im Bild gezeigte lokalisierte elastische (= potentielle) Energie wurde auf alle Atome "dissipiert", d.h. verteilt.
- Das ursprünglich ausgelenkte Atom wird seine Schwingungsamplitude entsprechend verringern - im Mittel genau so wie es mit klassischer "Reibung" beschrieben würde.
- **G. A. Tomlinson** hat diesen Mechanismus bereits im Jahr **1929** beschrieben.

- Aber erst jetzt (**2002**) wurde der Effekt direkt gemessen - von zwei Augsburger Wissenschaftlern, die mit Hilfe eines **Rasterkraftmikroskops** ein einzelnes Atom über eine Kristalloberfläche "schleppten".

Zweiter Hauptsatz und Philosophie

Advanced

- Der **zweite Hauptsatz** gibt aus mehreren Gründen, die hier aber nur angedeutet werden sollen, reichlich Anlaß zu philosophischen Betrachtungen:
- Der zweite Hauptsatz ist das einzige "Axiom" der harten (= mathematischen) Naturwissenschaft, das eine **Richtung der Zeit** definiert.
 - Denn alle anderen Grundgesetze oder Grundgleichungen der Physik sind **zeitinvariant**.
 - Das bedeutet, dass man in allen Gleichungen grundsätzlich die Variable Zeit t durch $-t$ ersetzen kann ohne dass Widersprüche auftauchen. Die Vorgänge, die dann rückwärts in der Zeit laufen, sind genauso Lösungen der Grundgleichungen wie die zeitlich vorwärtslaufenden Vorgänge.
 - Anders ausgedrückt: Es gibt z.B. in den Newtonschen Grundgesetzen, den Maxwell Gleichungen oder der Schrödingergleichung keine ausgezeichnete Richtung der Zeit. Ob ein Film, der z.B. Stöße zwischen Teilchen zeigt, oder die Bewegung einer Raumsonde durch das Sonnensystem, vorwärts oder rückwärts läuft, kann man schlicht nicht erkennen.
 - Nur der zweite Hauptsatz gibt der Zeit eine Richtung: Sie zeigt (für abgeschlossene Systeme) **immer** in Richtung **zunehmender** Entropie!
 - Das ist schon bemerkenswert. Insbesondere, weil der zweite Hauptsatz, wenn man so will, eigentlich gar kein richtiges Grundgesetz ist sondern nur eine mathematisch "triviale" Aussage über [Wahrscheinlichkeiten in "statistischen" Ensembles](#).
 - Zunehmende Entropie gibt es aber eigentlich gar nicht.
 - Entropie ist eigentlich in voller Schärfe nur für das thermodynamische Gleichgewicht (TD GG) definiert. Die Entropie von Systemen, die **nicht** im TD GG sind, ist erst mal nicht klar definiert.
 - Im TD GG gibt es aber gar keine Zeit mehr! Nichts ändert sich mehr, und deshalb kommt die Zeit als Variable auch nirgendwo mehr vor.
 - Hier liegt offenbar ein kleines Paradoxon! Es ist zwar weitgehend durch die Nichtgleichgewichts-Thermodynamik gelöst, aber ein Rest zum Philosophieren bleibt dennoch.
 - Wenn die Entropie des Universums immer nur zunehmen konnte (seit nunmehr rund und roh [15 Milliarden Jahren](#)), und auch weiterhin immer nur zunehmen wird, muss das Universum logischerweise mit relativ wenig Entropie gestartet sein.
 - Wieso? Zufall, oder steckt mehr dahinter? Müssen **Urknälle immer** Universen mit wenig Entropie produzieren?
 - Falls unser Universum zu der Klasse der irgendwann mal wieder kontrahierenden Universen gehören sollte (im Moment sieht es zwar nicht danach aus, aber das letzte Wort dazu ist noch nicht gesprochen), muß das Ende (mit hoher Entropie) dann aber irgendwie anders sein als der Anfang (Urknall mit wenig Entropie). Aber wie anders?
 - Oder läuft ab Beginn der Kontraktion die Zeit rückwärts, und die Entropie nimmt wieder ab?
 - Außerdem ist nicht so ganz klar, was mit der Entropie wird, die in schwarzen Löchern verschwindet. **Stephen Hawking** ("Eine kleine Geschichte der Zeit") hat z.B. soeben (Juli **2004**) seine bisherige Ansicht zu diesem Punkt widerrufen.
 - Entropie und **schwarze Löcher** sind irgendwie gekoppelt.
 - Der "**Ereignishorizont**" (**E.H.**) eines schwarzen Loches ist die gedachte Fläche einer Kugel um das schwarze Loch, aus der nichts je wieder herauskommen wird. Dieser **E.H.** hat eine Reihe von Eigenschaften, die identisch sind mit den Eigenschaften der Entropie.
 - Insbesondere ist seine Fläche direkt mit der Entropie des schwarzen Loches gekoppelt. Jedesmal wenn etwas Entropiehaltiges von einem schwarzen Loch verschlungen wird, wächst die Fläche seines **E.H.** (= die Oberfläche der Kugel mit dem Radius des **E.H.**) um exakt den entsprechenden Entropiebetrag.
 - Das ist ein ganz heißes Eisen in der modernen Physik, weil hier nämlich eine direkte Kopplung der Quantentheorie mit der allgemeinen Relativitätstheorie besteht! Die Entropie ist nämlich in letzter Konsequenz eine quantenphysikalische Größe (wir beschreiben irgendwie immer Teilchen), während schwarze Löcher nur der allgemeinen Relativitätstheorie gehorchen.
 - Diese beiden Großtheorien passen aber [überhaupt nicht zusammen](#). Das ist aber normalerweise kein Problem, da praktisch alle Phänomene entweder mit der einen **oder** mit der anderen beschrieben werden können. Nie braucht man beide - außer möglicherweise bei den Eigenheiten schwarzer Löcher.

5. Die Existenz vieler komplexer Systeme (z.B. die derzeitige Leserin) scheint im Widerspruch zum zweiten Hauptsatz zu sein.

- Aus ziemlich unordentlichen Zutaten (Milch, Kartoffelbrei, Schokoladeneis, **O₂**, **H₂O**, Whisky,...) bildet sich im Lauf der Zeit ein extrem geordnetes System; die Entropie hat heftig abgenommen, (jedenfalls bei den Meisten).
- Gut, das System ist nicht abgeschlossen, aber irgendwie gibt das doch zu denken. Noch pointierter: **Darwin** lehrt, dass im Laufe der Zeit biologische Systeme immer komplexer werden, die Entropie in der Biologie also abnimmt. Irgendwo scheint hier ein Widerspruch zu sitzen.
- Eine andere trickreiche Frage ist z.B. was im Moment des Todes geschieht, falls dann eine Seele oder sonst was, das [Informationsbehaftet](#) ist, den Körper verläßt. Nimmt die Entropie dann schlagartig zu?
- Genauer gefragt: Wie unterscheidet sich die Entropie eines zum Zeitpunkt $t - \Delta t$ lebenden Subjekts von der Entropie des zum Zeitpunkt t toten Subjekts für $\Delta t \Rightarrow 0$ und adiabatisches Sterben (d.h. keine Energieänderung)?
- Hier wird es ganz schnell nicht nur philosophisch, sondern sogar theologisch.

6. Die gute alte **Entropie**, und die neue und innovative **Information**, sind [eng gekoppelte Größen](#).









- Zumindest falls man versucht den Begriff Information quantitativ zu fassen.
- Das ist einfach zu sehen: Wir betrachten digitale Information, die sich dann immer in einem String aus Einsen und Nullen codieren läßt.
- Ein String aus **nur** Einsen, oder **nur** Nullen, kann nicht sehr viel Information enthalten, und da es nur eine Möglichkeit der Anordnung gibt ist seine Entropie = 0.
- Möglichst viel Abwechslung muß sein für möglichst viel Information, damit haben wir automatisch auch viel Entropie.
- Das Problem ist nur: In dieser Definition von Information hätte weißes Rauschen im Telefonhörer einen sehr viel höheren Informationsgehalt als z.B. der Netzzugang signalisierende Dauerton! Das erscheint ein bißchen unpassend, und liegt daran, dass es bislang keine gute Definition der in "Information" enthaltenen **Semantik** (\approx Bedeutung) gibt.

Hinreichend viele Punkte zum Philosophieren.

- Das muß man aber nicht selber tun, zu den angerissenen Themen sind viele allgemein verständliche Bücher geschrieben worden. Ein Beispiel:
- **P. Coveney und R. Highfield: The Arrow of Time**
(Fawcett Columbine, New York)
- Auch [R. Penrose](#) hat einiges zum Thema ausgeführt, das sich lohnt zu lesen.

Herleitung des "Gleichverteilungssatzes"

Advanced

-  In diesem Modul soll eigentlich der Gleichverteilungssatz hergeleitet werden.
 -  Nun - vergiß es. Es geht nicht auf halbwegs einfache Art und Weise.
-  [Feynman](#) (Kapitel 39-9) hat's versucht; aber seine Herleitung ist nicht übertrieben einfach (man muss die Stoßgesetze im Detail ganz schön verinnerlicht haben) und darüberhinaus nicht wirklich korrekt; da er eine nicht weiter bewiesene Annahme einbezieht.
-  Ähnlich der [Gerthsen](#) (22 Auflage, S. 208).
 -  Wer will kann da nachschauen.
-  Aber es hilft letztlich nur ein tiefer Blick in die statistische Thermodynamik.
 -  Dort treffen wir auf eine zentrale Funktion für thermodynamische Systeme, die sogenannte Zustandssumme. Damit kann man dann viele schöne Sachen treiben, u.a. auch den Gleichverteilungssatz (dann **Äquipartitionstheorem** genannt) beweisen.
 -  Leider tendieren die Formeln dazu, unhandlich und länglich zu sein. Deswegen lassen wir das Ganze hier.

Statistische Thermodynamik

Advanced

- Ach Leute laßt's - das ist ein zu weites Feld.
- So ungefähr schließt **Fontanes "Effi Briest"**, und das Zitat paßt auch ganz gut auf das Unterfangen, die statistische Thermodynamik in **einem** Hyperskript Modul abhandeln zu wollen.
- Es geht wirklich nicht. Oder doch?
- Nun ja, a bißerl was geht immer, und da wir im Hauptteil ([Matwiss II](#) inkl.) schon viele Grundpostulate der statistischen Thermodynamik kennengelernt haben, werden hier dann doch noch einige Zentralbegriffe ganz kursorisch beschreiben.
- Dabei kann man natürlich allenfalls das "G'schmäckle" rüberbringen. Wer ernsthaft in die statistische Thermodynamik einsteigen will, muß etwas mehr tun als nur diesen Modul zu lesen.

Grundpostulat

- Das Ziel der statistischen Thermodynamik ist einfach:
 - **Zurückführung der klassischen Thermodynamik auf die Bewegung und Wechselwirkung vieler Teilchen.** Dabei sollen nur die bekannten Grundgesetze der Physik verwendet werden, im wesentlichen also die klassische Mechanik, oder auch die Quantenmechanik.
 - Der Anspruch ist damit, dass Zentralbegriffe der phänomenologischen Thermodynamik, wie z.B. "**Temperatur**", "**Wärme**" oder "**Entropie**", sich als aus der Mechanik ableitbare Größen darstellen.
- Eine erste Konsequenz ist damit ebenfalls völlig klar:
 - Ein mit unbewaffneten Auge sichtbares **thermodynamisches System** umfasst so ca. **10^{20}** Teilchen. Es ist dann sowohl unmöglich als auch witzlos, sich mit einzelnen Teilchen zu beschäftigen.
 - Wir fragen deshalb immer nach **statistischen** Größen - Mittelwerte, Anordnungsmöglichkeiten, Wahrscheinlichkeiten, Fluktuationen, etc. - nicht umsonst heißt des Gebiet **statistische** Thermodynamik oder etwas allgemeiner **statistische Mechanik**.
- Es gibt in den beiden Matwiss Hyperskripten mehrere Ergänzungsmodule, die sich mit speziellen Bereichen dieser allgemeinen Fragestellung beschäftigen; wir haben:
 - **Temperatur und Druck.** Es wird für ein einfaches Gas gezeigt, wie die Begriffe Temperatur **T** und Druck **p** aus den Teilchenbewegungen und ihrer Wechselwirkung untereinander und mit der Wand eines Gefäßes hervorgehen. Am Rande fällt noch die allgemeine Gasgleichung **$pV = NRT$** ab.
 - **Zweiter Hauptsatz und "Philosophie".** Warum der **2.** Hauptsatz so bemerkenswert ist.
 - **Kombinatorik.** Einige mögliche Fragen und Antworten zu einfachen Fragen der Kombinatorik.
 - **Entropie und Information.** Was Information mit Thermodynamik zu tun hat.
 - **Zeitmittel = Scharmittel.** Wie man über zwei grundverschiedene Mittelungsverfahren zum selben Mittelwert kommen kann.
 - **Gaußverteilung, Wahrscheinlichste Abstände, Tabelle, Kurzfassung:** Mehrere Module zum Würfeln und "Random Walk".
 - **"Averages"** Wie man die **vektorielle** Größe "Geschwindigkeit" mittelt und daraus dann auch für die **skalare** Größe "kinetische Energie" einiges schlußfolgern kann.
 - **Ohmsches Gesetz.** Herleitung durch statistische Betrachtung der Elektronenbewegung in klassischer Sichtweise.

Die Fragestellung

- Wir betrachten ein **System** von vielen Teilchen. In dem betrachteten System können sich alle möglichen Teilchen befinden (Atome, Moleküle, Photonen, ...), die mit irgendwelchen Eigenschaften behaftet sind (kin. Energie, pot. Energie, Rotationsenergie, Ladung, Spin, ...). Es muß kein Gas sein, und wir können das Ganze quantenmechanisch oder klassisch betrachten.
- Damit wir ein reales physikalisches System beschreiben, müssen wir noch einige Randbedingungen einführen, z.B. dass Volumen V , Gesamtteilchenzahl $N = \sum n_i$ und Teilchenart i gegeben und konstant sein sollen.
- Wir definieren jetzt statistische Größen, die eine sinnvolle Aussage über das System machen, z.B. die mittlere Geschwindigkeit aller Teilchen oder nur der Teilchen der Sorte i , oder die Wahrscheinlichkeit dafür, in einem beliebig herausgegriffenen Untervolumen V_1 gerade N_1 Teilchen zu finden.
- Damit taucht ein erstes Problem auf:
- Mögliche Systeme und mögliche statistische Größen gibt es ohne Zahl. Im [Kombinatorikmodul](#) wird an einem einfachen Beispiel gezeigt, dass trotz einfacher Ausgangssituation ganz schnell eine Unzahl sinnvoller statistischer Fragen zusammenkommen können, und wie schwierig es sein kann, auch nur die einfachsten davon zu beantworten.
 - Leider müssen wir, um in der statistischen Thermodynamik zu sinnvollen Größen zu kommen, einigermaßen komplexe Fragen stellen.
 - Was für Fragen das sind, und welche Antworten man erhält, läßt sich in Anlehnung an den "Gerthsen" mit einem simplen Beispiel sehr gut demonstrieren. Dieses Beispiel hat zunächst überhaupt nichts mit Thermodynamik zu tun, liegt uns aber viel näher als abstrakte Teilchenwelten.
- Wir machen das hier sehr kurz, und ohne irgendwelche Herleitungen der auftretenden Formeln. Mehr dazu eben im "Gerthsen".
- Es geht also zunächst nur darum, wie man ein eingängiges und sinnvolles System definieren kann, und was man damit für sinnvolle Statistik treiben kann. Danach übertragen wir das Ganze auf Thermodynamik.

Das Buchstabenspiel

- Gegeben ist ein Sack mit sehr vielen gut gemischten einzelnen Buchstaben (z.B. eine Riesentüte Buchstabensuppe) und Leerzeichen (zusätzliche Bandnudelstücke).
- Um diesen Inhalt quantitativ zu definieren führen wir folgende Größen ein:
- i = Nummer des Buchstabens oder, allgemeiner, des Symbols ($i = 1 \Rightarrow \mathbf{A}$; $i = 2 \Rightarrow \mathbf{B}$ etc.). Mit dem Leerzeichen (" ") sind das z.B. 27 Symbole.
 - M_i = Anzahl des Symbols Nr. i im Sack. Wir unterstellen mal, dass die Häufigkeit der Symbole in etwa dem Vorkommen in einer passenden Sprache, z.B. Deutsch, entspricht (Leerzeichen sind am häufigsten, gefolgt von E usw.; Y, Z, etc. sind recht selten).
 - M = Anzahl aller Symbole = $\sum M_i$; summiert wird natürlich über alle i .
 - p_i = Wahrscheinlichkeit, beim wahllosen Hineinfassen ein i -Symbol zu "ziehen"; damit gilt $p_i = M_i / M$.
- Die folgende Tabelle zeigt jetzt die möglichen "sinnvollen" Fragen und die entsprechenden Antworten

Frage	Antwort	Kommentar
Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P_{seq} , nacheinander genau die Buchstaben zu ziehen, mit denen man eine bestimmte Sequenz bilden kann, z.B. TO_BE _OR_NOT_TO_BE	$P_{\text{seq}} = p_T \cdot p_O \cdot \dots \cdot p_E = \prod_{i=1}^{i=27} (p_i)^{n_i}$	n_i = Anzahl des i -ten Symbols in der Sequenz; kann auch = 0 sein. Wichtig: Für jede andere Sequenz aus diesen Symbolen hat P_{seq} denselben Wert.
Wieviel (verschiedene = unterscheidbare) Sequenzen Q_{kom} kann man mit der zugehörigen Komposition (= Bruttoformel) B₂E₂NO₄RT_{3_5} , die allgemein N Symbole enthält,	$Q_{\text{kom}}(n_i) = \frac{(\text{Gesamtzahl Symbole})!}{n_1! \cdot n_2! \cdot \dots} = \frac{\sum n_i!}{\prod n_i!}$ $Q_{\text{kom}}(\text{B}_2\text{E}_2\text{NO}_4\text{RT}_{3_5}) = \frac{18!}{2! \cdot 2! \cdot 4! \cdot 3! \cdot 5!} = 0,93 \cdot 10^{11}$	Die n_i sind sozusagen die Stöchiometriekoeffizienten der Bruttogleichung. Damit gilt auch $N = \sum n_i$. Summen und Produkte sind natürlich immer von $i = 1$ bis $i = 27$ zu nehmen.

realisieren		
Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P_{kom} für eine bestimmte Komposition ?	$P_{\text{kom}} = P_{\text{seq}} \cdot Q_{\text{kom}} = \frac{M!}{\prod_{i=1}^{i=27} n_i!} \cdot \prod_{i=1}^{i=27} (p_i)^{n_i}$	Es ist z.B. zwar viel wahrscheinlicher die Sequenz EEEEEEEEEEE...E zu ziehen als unseren Satz, da E der häufigste Buchstabe ist, aber da man mit E ₁₈ nur eine Komposition bilden kann, ist die B ₂ E ₂ N.... Komposition letztlich wahrscheinlicher
Was ist die wahrscheinlichste Komposition mit N Symbolen, die man zufällig ziehen wird? In anderen Worten: Was ist die Häufigkeitsverteilung $n_{i,0}$ dieser Kompositionen?	$n_{i,0} = N \cdot p_i = \frac{N \cdot M_i}{M}$	Einfaches Ergebnis nach involvierter Mathematik. Die Häufigkeit des Auftretens eines Symbols in der wahrscheinlichsten Komposition entspricht (wie man erwartet hätte), seiner Häufigkeit oder "Dichte" M_i/M im Sack .
Wie groß ist die logarithmische Wahrscheinlichkeit $S = \ln P_{i,0}$ für diese wahrscheinlichste Komposition?	$S \approx 0$	Damit $P_{i,0} \approx 1$, d.h. wir zögen immer die wahrscheinlichste Komposition. Das ist aber nur ein \approx Ergebnis, da zur Berechnung die Stirling Formel verwendet wurde. Jedenfalls ist die wahrscheinlichste Komposition bei nicht zu kleinen N aber extrem viel wahrscheinlicher als alle anderen.

- So weit so gut. Jetzt machen wir unser Buchstabensuppensystem aber etwas komplizierter (oder realistischer).
- Wir nehmen als **neuen Parameter** die Breite b_i der Buchstaben hinzu. Der Buchstabe "I" ist z.B. weniger breit als der Buchstabe "W".
 - Allgemein lassen wir für ein Symbol beliebige Breiten zu, auch für das Leerzeichen "_". Das ist dann etwas abstrakter als in einer realen Buchstabensuppe, in der die Buchstaben zwar verschiedene, aber ähnliche Breiten haben.
- Jetzt können wir neue Fragen stellen, insbesondere interessieren wir uns wie gute Buchdrucker, nur noch für Kompositionen, die eine **definierte Zeilenlänge** haben.
- Was man damit machen kann schauen wir uns in der Fortsetzung der Tabelle an. Die Fragen sind noch einfach, aber die Mathematik dazu kann involviert werden. Man braucht z.B. **Variationsrechnung** und die Methode der **Langrangeschen Parameter**.

Frage	Antwort	Kommentar
Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P_{seq} , eine Komposition aus N Symbolen mit der Breite $B = \sum n_i \cdot b_i$ zu ziehen, d.h. was für eine n_i-Verteilung erhalte ich jetzt unter dieser Bedingung ?	$n_i = \frac{N}{\sum_i p_i \cdot e^{\beta b_i}} \cdot p_i \cdot e^{\beta b_i} = \frac{N}{Z} \cdot p_i \cdot e^{\beta b_i}$	Es tritt ein neuer Parameter und eine daraus abgeleitete Schlüsselgröße auf: Der Parameter β und die Zustandssumme Z . Wir wollen der so definierten Verteilungsfunktion einen Namen geben und nennen sie Boltzmann-Verteilung .

- Zunächst ist zu klären: Was ist der Parameter β ?

- Formal ist es ein **Lagrangescher Parameter**, der in der mathematischen Ableitung des obigen Ergebnisses erforderlich wurde, weil jede mögliche Variation einer Komposition immer dieselbe Breite **B** haben muß.
- Von der Sache her ist es ein **Gewichtungsfaktor**. Das sieht man am besten (selber nachdenken!), wenn man obige Gleichung für **B** umschreibt; wir haben

$$B = \frac{N}{Z} \cdot \sum_i p_i \cdot b_i \cdot e^{\beta b_i}$$

- Im Grunde ist das auch klar: Falls wir schmale Sätze mit **N** Buchstaben bilden müssen, brauchen wir eher die schmalen Buchstaben um das hinzubekommen, bei langen Sätzen müssen wir bevorzugt die breiten Buchstaben nehmen. Irgendwie muß sich das dann ja durch einen eigenen Parameter niederschlagen.
- Dieser neue Parameter β muß aber irgendwie durch die Systemgrößen festgelegt sein, sich also aus den bekannten Eigenschaften des Systems plus den durch die Frage definierten Parametern berechnen lassen.
- Das ist auch so, aber: Leider kann man keine **einfache** Formel für den Zusammenhang zwischen den Grundgrößen **N**, **B**, p_i und β finden. Am einfachsten ist noch

$$B = N \cdot \frac{\partial (\ln Z)}{\partial \beta}$$

Bleibt noch der Summenterm, den wir **Zustandssumme** genannt haben, zu besprechen.

- Falls wir β kennen, ist diese **Zustandssumme** eine Zahl, sonst eben eine Funktion von β .
- Wer genau hinschaut merkt, dass sie aus dem Term $p_i \cdot e^{\beta b_i}$, der ja sowas wie eine modifizierte (und damit nicht mehr absolute) Wahrscheinlichkeit p_i^* ist, wieder eine absolute Wahrscheinlichkeit macht.
- Denn wenn man über alle relativen Wahrscheinlichkeiten p_i^* summiert, kommt nicht mehr **1** heraus. Damit aus den p_i^* **absolute** Wahrscheinlichkeiten werden, muß man dann durch die Summe über alle $p_i^* =$ Zustandssumme dividieren.

Aber die Zustandssumme ist viel mehr als ein Normierungsfaktor. Die Zustandssumme eines thermodynamischen Systems (wir werden gleich sehen wie das mit den Buchstaben zusammenhängt) ist der **Schlüssel zur Thermodynamik** wie wir sie kennen. Denn:

Die Zustandssumme eines Systems enthält *alle* Informationen über das betrachtete System!

Wir nehmen das erstmal nur so zur Kenntnis und gehen zunächst noch einen Schritt weiter mit dem Buchstabensalat.

- Wir produzieren jetzt (statistisch) beliebige Sequenzen und kleben dann die Buchstaben zusammen - wir haben dann eine **Zeile** mit irgendeiner Komposition und Breite gemacht.
- Viele** von diesen Zeilen werfen wir einen neuen Sack und beginnen das Spiel von vorne.

Statt einzelner Buchstaben oder Symbole ziehen wir jetzt (statistisch) ganze Zeilen.

- Aus den gezogenen Zeilen machen wir (statistisch) **viele** Bücher.
- Aus all den vielen **Büchern** wollen wir aber nur bestimmte Bücher betrachten, die wir "**kanonische**" Bücher nennen:
 - Kanonische** Bücher haben eine feste Anzahl N_k von Zeilen.
 - In **kanonischen** Büchern ist die Summe der Zeilenbreiten immer B_k

Ein **kanonisches** Buch enthält dann n^z_1 Zeilen der Breite B_1 , n^z_2 Zeilen der Breite B_2 , usw.; und $\sum B_i = B_k$.

- Die Wahrscheinlichkeit im Sack eine **Zeile** der Breite B_i zu finden sei P_i .

Jetzt kommt die wesentliche Frage:

Frage	Antwort	Kommentar
Was ist die Häufigkeitsverteilung oder Verteilungsfunktion der n^z_i in einem kanonischen Buch?	$n^z_i = \frac{N}{Z} \cdot P_i \cdot e^{\beta' B_i}$ $Z = \sum_i P_i \cdot e^{\beta' B_i} = \text{kanonische Zustandssumme}$	Das ist daselbe Ergebnis für die Zeilen symbolik, das wir schon für die Buchstaben hatten. Nur dass wir vorsichtshalber β' statt β schreiben. Formal ist das wieder die Boltzmann-Verteilung .

Man könnte noch sehr viel mehr machen, aber **wir** jetzt hören auf zu buchstabieren (im [Gerthsen](#) gibt es noch viel mehr), und erinnern uns nochmals an den **Zweck der Übung**:

- Es ging nur darum, wie man ein eingängiges und sinnvolles System definieren kann, und was man damit für Statistik treiben kann.
- Zumindest die Fragen waren nicht allzu schwer. **Aber was hat das Ganze mit statistischer Thermodynamik zu tun?**

Nun ja: Wir haben einen großen Teil der statistischen Mechanik mit diesem Spielchen bereits abgehandelt. **Wir müssen nur für die verwendeten Größen andere Namen wählen.**

- Hier ist eine Konversionstabelle

Buchstabenwelt	Thermodynamik
Buchstabe	Teilchen
Breite des Buchstabens	Teilchenenergie; Teilchen auf einem bestimmten <i>E</i> -Niveau
Logarithmische Wahrscheinlichkeit für wahrscheinlichste Kombination	Entropie
Zeile (Sequenz)	System
Zeilenbreite	Gesamtenergie des Systems
kanonisches Buch	Ensemble (Viele Systeme im thermischen Kontakt); siehe unten.
Parameter β	$-1/kT$
Zustandssumme	Zustandssumme

Alles klar? Natürlich nicht!

- Wie man auf diese Tabelle kommt, warum β sowas wie die reziproke absolute Temperatur ist, was ein Ensemble ist, und so weiter und so fort - das kann nicht auf Anhieb klar sein.
- Nicht umsonst braucht man eine ganze Vorlesung für eine erste komplette Abhandlung des Themas.

Aber zwei Punkte kann man doch mal mitnehmen.

- Die Art des statistischen Ansatzes und der Fragestellungen.
- Die Erkenntnis, dass dabei "zwanglos" durch die Art der Fragestellung einige neue, sehr allgemeine, und sehr wirkungsmächtige Begriffe auftreten (z.B. Zustandssumme, Verteilungsfunktion, reziproke Temperatur), die, wenn man erst einmal "durch" ist, dann als die Hauptwerkzeuge des Theoriegebäudes dienen.

Im Folgenden werden einige Begriffe noch etwas vertieft

Gesamtheiten oder Ensembles

- Normalerweise betrachten wir **ein System** von Teilchen, wie [oben definiert](#).
- Wir wollen dann u.a. wissen, wie sich das System entwickelt, d.h. was im Laufe der Zeit passiert. In einem nicht ganz trivialen System ändert sich z.B. Druck, Volumen, Energie oder Teilchenzahlen im Laufe der Zeit. Uns interessiert dann der **zeitliche** Mittelwert und seine Entwicklung.
- Zeitmittel** zu berechnen kann aber oft mühsam werden, da die Änderungen des Systems in der Zeit kompliziert sein können.
- In der Regel tut man sich leichter mit **Scharmitteln**. In anderen Worten: Es ist z.B. beim Würfelspiel leichter den Mittelwert der gewürfelten Zahlen zu berechnen oder zu messen, wenn man nicht mit **einem** Würfel **1000** mal würfelt, sondern einem Ensemble von z.B. **1000** Würfeln nur einmal. Das ist in einem [extra Modul](#) bereits dargestellt.
 - In noch anderen Worten: Es ist leichter, Mittelwerte aus einem kanonischen "**Buch**" (= Ensemble) zu berechnen, als aus nacheinander erstellten **Zeilen** (= System).
- Das ist der Inhalt der [Ergodenhypothese](#); wir haben damit schon ein zentrales (und nicht ganz problemloses) Lemma der statistischen Thermodynamik.
- Wozu brauchen wir die Ergodenhypothese? Weil sie erlaubt Mittelwerte **immer** als Scharmittel zu berechnen - vorausgesetzt wir verwenden einen sehr wichtigen "Trick" bei der Sache.
- Wir betrachten eben nicht nur **ein** System (dem wir dann in seiner zeitlichen Entwicklung folgen müssen) sondern viele (bis zu ∞ viele) **fiktive** weitere Systeme, die sinnvoll gekoppelt sind, und die alle hinsichtlich der gesuchten statistischen Größen unser eigentliches System **auch** repräsentieren könnten.
 - Die Menge all dieser System nennen wir dann ein **Ensemble** oder eine **Gesamtheit**. Um statistische Größen wie z.B. Mittelwerte zu berechnen, nehmen wir jetzt das **Scharmittel des Ensembles**.
- Soweit ist das alles ist noch beliebig allgemein. Wie immer, tut man sich aber leichter, wenn man Einschränkungen oder Fallunterscheidungen macht. Drei wichtige Fallunterscheidungen sind:
1. Unser System ist abgeschlossen (es sitzt in einem für alles undurchdringlichen "Kasten" mit gegebenen Volumen). Es kann also weder Energie, Entropie oder Teilchen aus der Umgebung beziehen. Dann muss sein Energie automatisch konstant sein, denn es gilt der Energieerhaltungssatz. Thermodynamisches Gleichgewicht liegt dann bei maximaler Entropie vor.
 - Das zugehörige **Ensemble** besteht also aus vielen Systemen, die alle die gleiche Zusammensetzung (= gleiche Teilchenzahlen und -sorten), gleiches Volumen und gleiche Temperatur, und darüberhinaus auch noch dieselbe **Energie** haben sollte.
 - Das geht nur bei voneinander völlig isolierten Systemen. Wir nennen derart charakterisierte Ensemble die **Mikrokanonische Gesamtheit**.
 - In mikrokanonischen **Büchern** müssten dann auch alle Zeilen gleichlang sein.
 2. Wir betrachten jetzt ein System, bei dem nur Zusammensetzung, Volumen und Temperatur gegeben ist. Um ein Ensemble zu erhalten, stellen wir uns so ein System jetzt wieder mehrfach vor.
 - Da wir nicht nicht wissen, wie groß die Energie eines solchen Systems ist, lassen wir verschiedene Energien zu
 - Das primäre Kennzeichen ist dann, dass alle Systeme des Ensembles dieselbe **Temperatur** haben werden. Das können wir erreichen indem wir die Systeme thermisch koppeln.
 - Ein derartiges Ensemble nennt man eine **Kanonische Gesamtheit**. Das ist der wichtigste Fall; er entspricht dem Buchstabenbeispiel mit dem kanonischen Buch.
 3. Wenn wir zwar noch gleiche Temperatur und gleiches Volumen fordern, aber Teilchenaustausch zulassen, haben wir die **Großkanonische Gesamtheit**.
 - Das war's dann auch schon. Mehr Fälle müssen nicht betrachtet werden.
 - Für jede der frei Gesamtheiten gibt es eine eigene Formel für die Zustandssumme; und damit ist das Thema dann "eigentlich" erledigt, denn die Zustandssumme enthält alles Wissenswerte, wie [oben](#) und weiter unten ausgeführt
- Woher kommen die etwas hochtrabenden Namen?
- "**Kanonisch**" heißt zunächst mal schlicht "richtunggebend" (aha, doch mit der **Kanone** verwandt). Es ist stark theologisch belegt; "kanonische" Schriften gehören zum "Kanon"; sie sind den kirchlichen Rechtsbestimmungen gemäß.
 - Schriften, die nicht zum Kanon gehörten wurden verbrannt, vorzugsweise zusammen mit ihren Autoren oder Advokaten.
 - Man redet aber gelegentlich auch anderweitig in der Physik von "kanonischen Gleichungen" im Sinne von Grundgleichungen.

Zustandssummen

Oben steht schon das Wesentliche:

- Für jedes Ensemble (und damit auch System) gibt es eine wohldefinierte Zustandssumme, und *diese Zustandssumme enthält alle Informationen über das betrachtete System!*
- Die Zustandssumme ist in der statistischen Thermodynamik sowas wie die **Wellenfunktion** in der Quantenmechanik, und diese Analogie kann auch auf der formalen Ebene ganz gut begründet werden. Alles was man über das System wissen will (und kann), z.B. innerer Energie, Entropie, freie Enthalpie, usw., lässt sich aus der Zustandssumme extrahieren. Hier ein paar Formeln dazu:

$$\begin{aligned}
 \text{Innere Energie } U &= kT \cdot \left(\frac{\partial (\ln Z)}{\partial (\ln T)} \right)_V \\
 \text{Entropie } S &= k \cdot \ln Z + k \cdot \left(\frac{\partial (\ln Z)}{\partial (\ln T)} \right)_V \\
 \text{Druck } p &= kT \cdot \left(\frac{\partial (\ln Z)}{\partial \ln V} \right)_T \\
 \text{Freie Enthalpie } G &= -kT \cdot \ln Z - \left(\frac{\partial (\ln Z)}{\partial (\ln V)} \right)_T
 \end{aligned}$$

Aber was *ist* denn die Zustandssumme selbst? Hier eine (etwas vereinfachte Interpretation)

- Summiert wird über alle verfügbare Energieniveaus des Systems (Wir nehmen hier schon mal ein bißchen Quantentheorie mit hinein, und wissen damit, dass i.a. die Energie in diskreten Niveaus auftritt). Wir haben damit eigentlich eine "Energiesumme".
- Da aber jeder erlaubte Zustand eine wohldefinierte Energie hat, summieren wir eben auch über alle erlaubten Zustände (falls Entartung auftreten kann, ist das leicht einzubeziehen).
- Der von der Temperatur abhängige Zahlenwert der Zustandssumme für ein bestimmtes System gibt nun an (qualitativ betrachtet und ungefähr), wieviel Zustände dem System *thermisch "zugänglich" sind*, also bei der gegebenen Temperatur besetzt werden können (und damit auch besetzt sein werden).
- Also eine wunderbare Sache! Wir müssen nur noch Zustandssummen berechnen, alles weitere ergibt sich von selbst?
 - Nicht ganz: Es gilt der 1. Hauptsatz der Betriebswirtschaft; hier in der Version als Satz von der Erhaltung der mathematischen Schwierigkeit: *Zustandssummen sind notorisch schwierig zu berechnen!*
 - Wer Lust hat, kann sich das mal am Beispiel der Zustandssumme eines Kristalls anschauen

Verteilungsfunktionen

Im Buchstabenspiel kamen schnell Verteilungsfunktionen vor, zum ersten mal bei der Frage nach der wahrscheinlichsten Verteilung.

- Dann haben wir die Verteilungsfunktion der n_i in einer Zeile sogar *Boltzmann-Verteilung* genannt.
- Warum? Das verstehen wir sofort, wenn wir die Frage jetzt mit Hilfe der Tabelle ins "Thermodynamische" übersetzen. Die Frage lautet dann
- Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P_{sys} , ein System aus N Teilchen mit der Gesamtenergie E zu erhalten, d.h. wie verteilen sich die Teilchen auf die vorhandene Energiezustände?

Das muss natürlich (für klassische Teilchen) genau die uns schon geläufige Boltzmann-Verteilung sein. Allerdings scheinen wir ein Problem zu haben:

- Die Boltzmann-Verteilung kommt im Hyperscript häufiger vor, allerdings nie mit einer Zustandssumme behaftet. In Kapitel 6.1.2 (Energiebarrieren und ihre Überwindung) wird eine sehr einfache Formel *ohne* Zustandssumme eingeführt. Irgendwas scheint nicht so richtig zu passen.
- Wo der Haken liegt, ist in einem anderen Modul ausgeführt.
- Zum Ergebnis aber nur soviel: *Es gibt keinen Haken*. Die einfache Formel in Kapitel 6.1.2 ist, wie dort angemerkt, eine (sehr gute) *Näherung*, und unter den angegebenen Bedingungen voll gültig.

Die Boltzmann-Verteilung gilt aber, wie wir wissen, nur für **klassische** Teilchen. Reale Teilchen sind aber nicht klassisch.

Wo liegt der Unterschied? In genau zwei Punkten:

- Reale Teilchen (derselben Sorte) sind entweder **Fermionen** oder **Bosonen**; sie sind prinzipiell **nicht** unterscheidbar (im Gegensatz zu klassischen Teilchen; die **immer prinzipiell unterscheidbar** sind)
- **Fermionen** dürfen nicht denselben Zustand haben (**Pauli-Prinzip**).

Was würde das im Buchstabenspiel bedeuten? Schauen wir uns die Sequenz **TO_BE_OR_NOT_TO_BE** nochmal an.

Klassisch können wir sie von allen anderen Sequenzen, die mit der zugehörigen Komposition **B₂E₂NO₄RT_{3_5}** erstellt werden können unterscheiden, denn wir können ein "T" von einem "O" usw. unterscheiden.

Deshalb mußten wir für **P_{kom}** die Wahrscheinlichkeit, diese Buchstaben zu "ziehen", mit **Q_{Seq}**, der Zahl der möglichen Sequenzen zu dieser Komposition, multiplizieren

Quantenmechanisch müssen wir erstmal zwischen **Bosonen** und **Fermionen** unterscheiden. In jedem Fall haben wir Einschränkungen der Auswahlfreiheit

Für **Bosonen** sind alle Sequenzen zur Komposition **B₂E₂NO₄RT_{3_5}** gleich; die Multiplikation mit **Q_{Seq}** fällt weg. Von anderen Sequenzen unterscheidet sich die gewählte nur durch die Länge = Energie.

Für **Fermionen** sind auch alle Sequenzen zur obigen Komposition gleich, aber da identische Buchstaben Teilchen mit identischer Energie repräsentieren, darf jeder Buchstabe nur **einmal** vorkommen; die einzige mögliche Komposition wäre also **BENORT_**. Entsprechend müssen wir dann auch die Formeln ändern.

Statt der Boltzmann-Verteilung erhalten wir dann die **Bose-Einstein Verteilung** bzw. die **Fermi-Dirac Verteilung**.

Phasenraum

Ein typisches System der Thermodynamik besteht z.B. aus **N = 10²⁰** Teilchen. Eine Detailbeschreibung müßte dann mindestens **6N = 6 · 10²⁰** Parameter definieren und verfolgen: Die je drei Komponenten des Orts- und Impulsvektors eines Teilchens, und das dann für **alle** Teilchen.

Wohl hoffnungslos, oder läßt sich da was machen? Es läßt sich was machen: Wir erfinden den **Phasenraum**!

Wir definieren einfach ein **6N**-dimensionales Koordinatensystem mit je **3N** Orts- und Impulsachsen. In diesem hochdimensionalen **Phasenraum** wird unser System dann durch einen schlichten **Punkt** vollständig beschrieben.

Das erscheint ein einigermaßen verschwenderischer Umgang mit Dimensionen zu sein, aber die mathematische Physik (ganz zu schweigen von der reinen Mathematik) hat damit kein Problem. Der in der "richtigen" Quantentheorie unverzichtbare **Hilbertraum** hat sogar ∞ viele Dimensionen und ist trotzdem extrem nützlich.

Unser Systempunkt steht aber nicht still, sondern saust, den Regeln der Mechanik folgend, im Phasenraum herum - die Koordinaten und Impulse der Teilchen ändern sich ja ständig.

Wenn wir ein ganzes **Ensemble** von Systemen betrachten, haben wir jetzt **viele** herumsausende Punkte. Jeder Punkt definiert im Laufe der Zeit eine Bahn, oder vornehmer gesagt, eine **Trajektorie** im Phasenraum.

Der Trick ist jetzt, dass unsere Ensemble-Punktwolke im Phasenraum einigen Gesetzmäßigkeiten unterworfen ist, mit denen man erstaunlich viel anfangen kann. Hier nur die prominentesten Beispiele:

Wenn alle System dieselbe Energie **H** haben sollen, müssen sie alle immer auf der Hyperfläche **H(x_i, p_i) = const**, z.B. der Oberfläche einer **N**-dim Hyperkugel liegen. Eine Eigenart hochdimensionaler Räume ist nun, dass das Volumen einer Hyperkugel sich praktisch vollständig in einer nahezu beliebig dünnen Schale "unterhalb" der Oberfläche befindet. Damit kann man die Dichte der Systempunkte definieren, und erhält ein fundamentales Theorem:

Liouvillescher Satz: Die Punkte im Phasenraum können sich bewegen wie sie wollen, aber ihre Dichte wird exakt konstant bleiben. Das hat weitreichende Auswirkungen, auf die wir hier aber nicht weiter eingehen wollen.

Die uns schon bekannten **Ergodenhypothese** lautet im Phasenraum so: Jeder dem System zugängliche Punkt im Phasenraum wird früher oder später auch "besucht" werden.

Das führt dann aber auf ein gewisses Problem: Wenn ein bestimmter jetzt erreichter Punkt schon früher mal vom System belegt war, dann befindet es sich jetzt **exakt** im gleichen Zustand wie zu einer früheren Zeit. Es hat dann keine Wahl mehr und muss **exakt** die gleiche **Trajektorie** wieder und wieder durchlaufen - damit wird es eine **periodische** Bewegung durchführen. Die Zukunft ist festgelegt!

Das ist das (offenbar physikalisch unsinnige) **Widerkehr Theorem** von **Poincaré**, dessen (schwierige) Widerlegung schnurstracks zu Begriffen wie "Chaos", "Fraktale", etc., führt.

Nimmt man Quantentheorie dazu, stellt man fest, dass das "Elementarvolumen" des Phasenraum mit **N** Dimensionen gerade **h^{3N}** ist (**h** = Plancksches Wirkungsquantum). Damit ist eine **Definition der Entropie** möglich, bei der der Nullpunkt der Entropieskala nicht mehr willkürlich ist.

■ Damit aber genug; nur noch ein Hinweis: In der Chaostheorie, oder besser und allgemeiner gesagt, der nichtlinearen Physik, ist der Phasenraum ein zentraler Schlüsselbegriff (allerdings dann meist wieder mit überschaubarer Dimensionenanzahl).

Freiheitsgrade der Rotation

Advanced

- Da Sie diesen Modul aufgemacht haben, sind Sie möglicherweise über die Zahl " $f = 2$ " bei den Freiheitsgraden der Rotation eines zweiatomigen Moleküls gestolpert. Bis vor kurzem stand im Backbone auch noch:
- "Bei einem 2-atomigen Gas wird es komplizierter: Zu den 3 Freiheitsgraden der Translation kommen im Prinzip noch 3 Freiheitsgrade der Rotation (es kann um zwei Achsen senkrecht zur Bindungsrichtung *und um die Bindungsachse* rotieren) und Freiheitsgrade möglicher Schwingungen".
 - Über die "3" sind dann andere Leser gestolpert.
- Was ist nun richtig? $f = 2$ oder 3? Schauen wir in klassische Textbücher:
- Im "[Wedler](#)" steht: "*Das Trägheitsmoment für die Rotation um die Molekülachse ist verschwindend klein; die Rotationsenergie wird ... nur durch die Rotation um die senkrecht zur Molekülachse stehenden Achsen bestimmt*". Schon wahr, aber der Freiheitsgrad ist trotzdem da - es gibt keine "kleinen" Freiheitsgrade.
 - Der "[Atkins](#)" weiß (Kapitel 22.3): "*Bei linearen Molekülen ist keine Rotation um die z-Achse möglich*", sagt aber nicht warum.
 - Beide sind sich also einig: Wir haben $f = 2$ für die Rotationsfreiheitsgrade. Es wird nur nicht so ganz klar, warum.
- Wir kommen hier auf ein typisches didaktisches Problem: Die [Komplementarität zwischen Klarheit und Wahrheit](#). Aber schauen wir mal etwas genauer hin:
- Im Rahmen der klassischen Mechanik können wir über Atome und Moleküle eigentlich gar nicht so recht reden, ein zweiatomiges Molekül können wir allenfalls in zwei *verschiedenen* Abstraktionsformen beschreiben:
1. Als zwei Massenpunkte, die "irgendwie" durch eine Art Feder zusammengehalten werden.
 2. Als zwei Kugeln mit kleinem, aber endlichem Durchmesser, die "irgendwie" durch eine Art Feder zusammengehalten werden. Die Masse der Kugeln können wir dabei homogen oder irgendwie sonst in der Kugel verteilen.
- Bezüglich der Freiheitsgrade der Rotation besteht zwischen den beiden Modellen aber ein fundamentaler Unterschied.
- Im ersten Fall hat die "Massenpunkthantel" *kein* Trägheitsmoment bei Rotationen um die z -Achse. Diese Rotation kann also *keine* Energie aufnehmen; die Zahl der Rotationsfreiheitsgrade ist $f = 2$.
 - Im zweiten Fall gilt das nicht; die Zahl der Freiheitsgrade wäre $f = 3$.
- Der zweite Fall ist aber eigentlich der realistischere; deshalb stand es bis vor kurzem auch noch so im Backbone. Allerdings laufen wir dann in ein (schamhaft unterschlagenes) Problem:
- Auch ein einzelnes "Kugelatom" hätte jetzt schon 3 Freiheitsgrade der Rotation - es könnte als Kugel ja auch schon selbst rotieren und dadurch Energie aufnehmen.
- Das Problem wird klar: In ganz einfachen klassischen Modellierungen läßt sich die Zahl der Freiheitsgrade nicht eindeutig beschreiben.
- Aber mittels der [spezifischen Wärme](#) kann man sie messen! Man findet eher $f = 2$ für den Rotationsteil, und vermittelt dann naturgemäß diese Zahl.
 - Erst mit der Quantentheorie wird das Ganze dann wirklich klarer, aber das wissen wir ja schon.
- Die wesentliche Argumentationskette ist im übrigen von dieser Unsicherheit gar nicht berührt.
- Denn wieviele Freiheitsgrade ein zweiatomiges Molekül auch "wirklich" haben sollte - es ist *eine* wohldefinierte Zahl. Und damit ist die spezifische Wärme aller zweiatomigen Moleküle konstant und gleich - im eklatanten Widerspruch zum Experiment.
 - Dieser Widerspruch alleine, unabhängig vom errechneten Zahlenwert, reicht schon völlig aus, um die Notwendigkeit eines "Paradigmenwechsels" zu begründen.

Entropie und Information

Advanced

Wenn wir den Zusammenhang von **Entropie** und **Information** näher beleuchten wollen, müssen wir uns zunächst mal anschauen, wie man Information *quantitativ* definiert.

Die erste wichtige Erkenntnis dazu ist: Das geht überhaupt nicht so, wie man sich das naiv vorstellen würde. Schauen wir ein Beispiel an:

Welcher der zwei nachfolgenden Symbolketten enthält mehr Information?

1. **PRÜFUNG BESTANDEN**

2. **ARFGUND SEPÜNNBET**

Die an sich klare Antwort "1" ist falsch.

Denn die beiden Sätze enthalten technisch, d.h. von der **Syntax** (= Muster, Zusammenstellung) her gesehen, exakt dieselbe Information, denn die beiden Zeichenketten bestehen aus einem identischen Satz von Zeichen.

Die Zahl an *Bits*, die man braucht, um beide Sätze zu kodieren und dann vielleicht auf irgendeinem Datenkanal zu übertragen ist identisch. Auch die Störanfälligkeit, der mögliche Verlust an Information ist dieselbe für die beiden Sätze sowie für alle anderen möglichen Sequenzen, die sich aus der gegebenen Menge an Symbolen bilden lassen.

Dass *wir* das Gefühl haben, dass eigentlich nur eine einzige Sequenz (die Nr. 1) Sinn ergibt und damit Information enthält, liegt daran, dass *wir* automatisch die **Semantik** (= Bedeutung) einer Symbolsequenz betrachten.

Maschinen können das aber nicht; siehe das grandiose Scheitern der "**künstlichen Intelligenz**".

Es gibt deshalb keine befriedigende Definition von Information, die auch der *Bedeutung* der betrachteten Information gerecht wird; selbst nur auf die Syntax bezogene Definitionen sind im Grunde noch unbefriedigend.

Da wir aber nichts Besseres haben, nehmen wir die klassische Definition, von **Shannon 1948** eingeführt.

Betrachten wir zunächst eine Symbolmenge, z.B. ein Alphabet, mit **N** Zeichen oder Symbolen. Damit treten in *statistisch* gebildeten Symbolketten alle Symbole gleich häufig auf (im Gegensatz zu *Wörtern* einer Sprache, z.B. der Deutschen, in denen z.B. das Symbol "E" sehr viel häufiger auftreten wird als "Y").

Damit ist die Wahrscheinlichkeit p_i dafür, dass ein Symbol vorkommt, für alle Symbole gleich groß und wir haben $p_i = p = 1/N$

Nebenbei bemerkt: Wenn wir die p_i unterschiedlich groß machen würden und dann anfangen Symbolketten zu bilden, landen wir ganz schnell bei den Prinzipien der *statistischen Thermodynamik*.

Wieviel Information steckt in *einem* Zeichen?

Stellen wir uns vor, wir warten bei der Übermittlung einer Sequenz auf das nächste Symbol. Wir definieren die im Zeichen steckende Information I über die Formel

$$N = 2^I$$

I ist dann schlicht die Zahl der Ja/Nein Fragen, die man braucht um mit der *geringstmöglichen* Anzahl an Fragen herauszufinden, um welches Symbol es sich handelt

Das "geringstmöglich" ist dabei ein bißchen unpräzise. Wir würden aber z.B. bei einem Alphabet uns nicht naiv wie folgt durchfragen: Ist es **A**? - Nein, Ist es **B**?, ...; sondern fragen: Kommt es aus der 1. Hälfte? - Nein; 1. Hälfte der 2. Hälfte?,... . Nach jeder derartigen Frage bleibt dann immer nur noch die Hälfte der Möglichkeiten.

Damit haben wir eine 1. Definition für Information

$$I = \lg N = \lg (1/p)$$

Dabei steht " \lg " für den "Logarithmus dualis", den Logarithmus zur Basis 2.

Das ist aber zu einfach um damit viel anfangen zu können, Deshalb unterstellen wir jetzt, dass die Einzelwahrscheinlichkeiten p_i des Auftretens der Symbole verschieden sind - so wie in einem "richtigen" Alphabet im Kontext einer "richtigen" Sprache.

Die Information $I(z_i)$, die im i -ten Symbol (= z_i) steckt, ist dann offenbar

$$I(z_i) = \lg N = \lg (1/p_i) = -\lg (p_i)$$

Unwahrscheinliche Buchstaben enthalten dann mehr Information als wahrscheinliche. Das ist auch OK, denn wenn wir in einer Übertragung ein "y" oder "x" bekommen, wissen wir einfach mehr als wenn mal wieder ein "e" rüberwächst.

So gesehen können wir den Informationsgehalt einer Nachricht auch wie folgt definieren:

Der Informationsgehalt eines übermittelten Symbols ist proportional zum Grad unserer **Überraschung**.

- Wenn wieder mal ein "e" kommt, hält sich die Überraschung in Grenzen, aber ein "y" erwarten wir halt eher nicht¹⁾.

Im nächsten Schritt interessieren wir uns nur noch für den **Mittelwert H** der Information, der in einem durch die p_i definierten spezifischen sprachbezogenen Alphabet mit N Symbolen steckt.

- Um einen zum Mittelwert proportionalen Wert H zu erhalten, müssen wir über die in den Symbolen enthaltene Information **multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens** summieren; wir haben also

$$H = \sum_{i=1}^N p_i \cdot I(p_i) = - \sum_{i=1}^N p_i \cdot \log_2(p_i)$$

Das ist die klassische Formel von Shannon. Die Größe H hat er, und das sollte uns jetzt nicht all zu sehr verblüffen, **Entropie** genannt.

- Die Bedeutung von H für die Informationstheorie liegt darin, dass wenn wir Z Zeichen übertragen wollen, das Produkt $H \cdot Z$ direkt die Mindestzahl der **bits** angibt, die man braucht um mit dem Alphabet Information übertragen zu können.

Aber warum nennt Shannon diesen Informationsmittelwert **Entropie**? Ist das tatsächlich dasselbe, wie die Entropie in der Thermodynamik?

Nun ja - nicht exakt. But close enough. Von der thermodynamischen Entropie S , wie sie in der [statistischen Thermodynamik](#) definiert wird, unterscheidet sich H nur in zwei verhältnismäßig trivialen Punkten:

- 1. Die oben indirekt angesprochene **Proportionalitätskonstante** (die in den Gleichungen immer = 1 gesetzt ist) muss k = Boltzmannkonstante sein. Aber das ist wahrlich trivial; wir messen nur mit verschiedenen Maßsystemen.
- 2. Die korrekte thermodynamische Entropie, die eigentlich nur für Gleichgewicht definiert ist, entspricht genau genommen nur dem **Maximalwert** von H , den wir für Gleichverteilung der Symbole erhalten.

Wenn man dann das alles gebührend berücksichtigt, erhält man eine interessante Beziehung für die **thermodynamische Entropie**, die in einem bit Information steckt:

$$S(1 \text{ bit}) = -k \cdot \ln 2$$

- Das bedeutet, dass eine Entropieerhöhung von $0,957 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ in einem gegebenen System, genau ein **bit** an Information vernichtet. Und da die Entropie in einem abgeschlossenen System nicht abnehmen kann, kann auch keine Information spontan entstehen.
- Das ist nicht nur "Theorie", sondern damit konnte Leo **Szilard** zum ersten Mal eines der berühmtesten offenen Probleme der Thermodynamik, den "Maxwellschen Dämon" erklären. Mal selbst Googeln; Stichworte: information entropie maxwell dämon.

Immerhin, irgendwie scheinen die gute alte **Entropie** und die noch recht junge und nicht sonderlich gut definierte **Information** zusammenzuhängen. Hat das was zu bedeuten? Wird die Informatik möglicherweise auch mal zu einem Untergebiet der Physik, so wie die Chemie?

- Nichts genaues weiß man nicht. Es gibt berühmte Leute, die sehr konträre Ansichten vertreten. [Atkins](#), z.B. hält das alles für trivial bis Blödsinn, während [Penrose](#) darin einen der Schlüssel für die künftige "neue" Physik sieht.
- Wir werden sehen.

¹⁾ Das häufigste Zeichen der deutschen Sprache ist übrigens das " ", der Leerschritt, mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.151. Danach kommen E (0.147), N (0.088), R (0.068) und I (0.063). Schlußlichter sind Y (0.000173), Q (0.000142) und X (0.000129).

Der Ausnahmekristall Silizium

Advanced

Die Grundregeln für atomare Fehlstellen in (einfachen) Kristallen (= Metalle) waren:

- [Bildungsenthalpien](#) für Leerstellen im **1 eV** Bereich (ungefähr mit Schmelzpunkt skalierend).
- Bildungsenthalpien für Zwischengitteratome deutlich höher; damit überwiegen bei weitem die Leerstellen. Man kann deshalb die Zwischengitteratome schlicht "vergessen".
- [Bildungsentropien](#) für beiden Fälle liegen etwa bei **1k**; d.h. die Defekte reichen nicht weit ins Gitter, d.h. Atome "neben" den Defekten merken davon kaum was.
- Die Maximalkonzentration am Schmelzpunkt liegt so bei **10⁻⁴**.
- Damit läuft die Diffusion substitutioneller Fremdatome *immer* über den [Leerstellenmechanismus](#).

Für den einfachen Kristall Silizium stimmt das aber alles nicht so richtig!

- Es entbehrt nicht einer gewissen Ironie, dass in dem Material, dessen atomare Fehlstellen technisch mit Abstand am wichtigsten sind (nämlich in der **Si**-Mikroelektronik), das quantitative Verständnis bei weitem nicht so gut ist wie z.B. bei Gold oder anderen verhältnismäßig unwichtigen Metallen.
- Selbst heute (**2004**) kann man sich über atomare Fehlstellen in Silizium und die damit zusammenhängende Diffusion noch trefflich streiten. Das gilt im Übrigen auch für andere Halbleiterkristalle.

Was ist nun anders: Hier eine Liste - ohne Gewähr für die Einzelheiten:

- Die Bildungsenergie für Leerstellen ist *unverhältnismäßig hoch*; so um **(2 - 3)eV**. Damit ist die Gleichgewichtskonzentration selbst am Schmelzpunkt so klein (**< 10⁻⁶**), dass sie bis heute keiner direkten Messung zugänglich ist. Das gilt aber auch für andere (Halbleiter)kristalle, ist also alleine noch nichts besonderes.
- Die Bildungsenergie für Zwischengitteratome ist zwar auch hoch, aber *nicht viel höher als die der Leerstellen*. Damit ist **Si** unter den bekannteren Kristallen der einzige, in dem man Zwischengitteratome im thermischen Gleichgewicht nicht schlicht "vergessen" kann.
- Die *Bildungsentropie ist hoch*, die Defekte sind "ausgeschmiert". Das führt zu einigen neuen möglichen Mechanismen bei der Reaktion zweier atomaren Fehlstellen.
- Die Diffusion der für die Technik so wichtigen Dotierelemente **P, B, As** (aber auch bei alle anderen) erfolgt deshalb teilweise mit *ungewöhnlichen* Mechanismen, die Eigen-Zwischengitteratome "benutzen". Sie ist damit viel komplizierter als in jedem Metall, und entsprechend in der Praxis schwieriger zu handhaben.
- Die technisch verwendeten [riesigen Siliziumkristalle](#) sind nahezu perfekt - sie enthalten keine Korngrenzen oder Versetzungen und nur sehr kleine Konzentrationen der unvermeidlichen Fremdatome (die Verunreinigungen). Trotzdem ist vor allem die Konzentration an *atomar gelöstem Sauerstoff* (und evtl. noch Kohlenstoff) in derselben Größenordnung wie die der atomaren Fehlstellen. Damit haben wir ein ganzes Spektrum an atomaren Fehlstellen in vergleichbaren Konzentrationen, die untereinander (beim Abkühlen des Kristalls) in mannigfacher Weise reagieren können.
- Da es sonst *keine weiteren Defekte* gibt an denen die die atomaren Fehlstellen "ausheilen" könnten, sind sie (und ihre Reaktionsprodukte) auch bei Raumtemperatur noch da, obwohl die extrem kleine Gleichgewichtskonzentration dann eigentlich nahezu komplettes Verschwinden fordern würde. Damit ist letztlich die Perfektion der **Si**-Kristalle kompromittiert - mit negativen Folgen für die daraus herzustellenden Produkte.

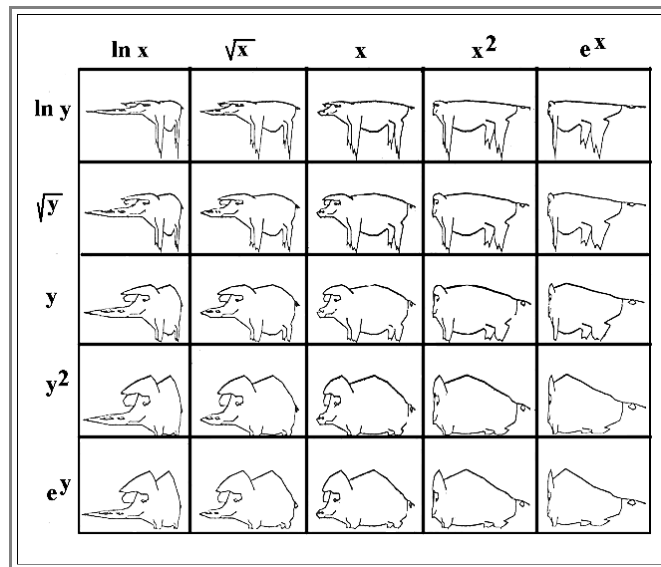
Im Endeffekt mußten für jeden Fortschritt in der Integrationsdichte der Mikroelektronik große Anstrengungen im "Management" der atomaren Fehlstellen im **Si** gemacht werden - bei der Kristallzucht und beim Prozessieren danach.

- Darin liegt dann einer der Gründe für ultra-hyperteure Kristallzuchtversuche im Weltall, oder besser gesagt, an Bord des Space-Shuttles.

Skalenschwein

Wie man durch geschickte Änderung der Skalen im Koordinationsystem aus einem Schwein einen Affen oder einen Stier machen kann, ist unten gezeigt.

- Diese kleine Perle der numerischen Mathematik stammt aus einer Zeit als es noch keine **PCs** gab. Leider ließ sich der Urheber nicht mehr ermitteln.



Etymologie von "Entropie"

■ Hier das Originalzitat von Clausius (1865; meine Hervorhebungen)

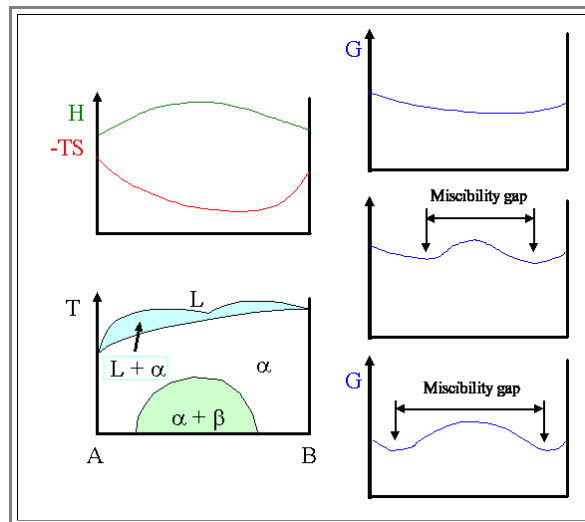
- "Sucht man für **S** (die Entropie) einen bezeichnenden Namen, so könnte man, ähnlich wie von der Größe **U** (der inneren Energie) gesagt ist, sie sey der Wärme- und Werkinhalt des Körpers, von der Größe **S** sagen sie sey der *Verwandlungsinhalt* des Körpers. Da ich es aber für besser halte, die Namen derartiger für die Wissenschaft wichtiger Größen aus den alten Sprachen zu entnehmen, damit sie unverändert in allen neuen Sprachen angewandt werden können, so schlage ich vor, die Größe **S** nach dem griechischen Worte "*tropae*", die *Verwandlung*, die **Entropie** des Körpers zu nennen.

Das Wort Entropie habe ich absichtlich dem Wort Energie möglichst ähnlich nachgebildet, denn die beiden Größen, welche durch diese Worte benannt werden sollen, sind ihren physikalischen Bedeutungen nach einander so nahe verwandt, daß eine gewisse Gleichartigkeit in der Benennung mir zweckmäßig zu seyn scheint."

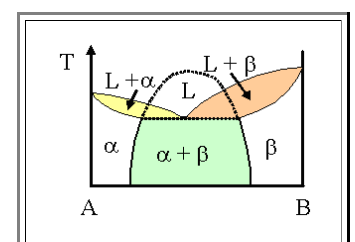
Free Enthalpy and Phase Diagrams

Advanced

- When we first introduced phase diagrams, we assumed that the two components mix well, i.e. that they "like" each other.
- In other words, the free enthalpy for any mix and temperature is *always* lower than that of equal amounts of the pure components
- If we examine the **Cu - Ni** case [used as example](#), we see that in terms of only the enthalpy H - i.e. the binding energy between the atoms - **Cu** indeed "likes" **Ni**, but **Ni** is not so happy with **Cu** atom as neighbors.
- We see that, because the enthalpy at the **Cu** side goes *down* with some **Ni** atoms added, while on the **Ni** side it goes *up*. However, the effect is small, because the total enthalpy curve is close to a straight line between the two extremes, and a straight line simply indicates total indifference as to one's neighbor.
- The entropy always increases with mixing; in consequence the *free* enthalpy for the **Cu - Ni** example is always "hanging down" for the temperature range considered (only at extremely low temperatures it must eventually come up).
- What happens if we try to mix atoms that really hate each other; i.e. the enthalpy curve goes up from both ends if we add **A** or **B**?
 - The answer - you guessed it (hopefully) - is clear: You get *eutectic* and *peritectic* behavior.
 - How? That's what we are going to look at in this module, however, because it tends to get a bit involved, only in cursory way.
 - First let's look at eutectic behavior. For that we only need to go through the possibilities inherent in the superposition of an "up" enthalpy H curve with a "down" $-TS$ curve; what happens then is shown below:



- It's rather obvious. While for high temperatures the $-TS$ term still may win; i.e. the free enthalpy is completely "hanging through" with only *one* minimum, the situation changes with decreasing temperature T .
 - The free enthalpy curve will start to bend upwards somewhere in the middle. It now has *two* minima (for solid phases), and that means that a mixture of two solid phases is energetically favorable.
 - A "**miscibility gap**" develops at some temperature T_{Mis} and spreads with decreasing T . This produces the light green area in the schematic phase diagram above.
 - The phase diagram shown also indicates that the area of complete miscibility in the $L + \alpha$ will no longer be a simple lens, but may be somewhat distorted, too
- The next step is easy to imagine. Just suppose that T_{Mis} is larger than the liquidus temperature at some concentration.
 - What you would get then is something like this:
- You end up with an eutectic phase diagram by necessity!
 - Of course, the details of the two "ears" with the phase mix liquid and solid depends on the particulars of the system
 - And for very peculiar systems, one "ear" flips down to produce a *peritectic* phase diagram!



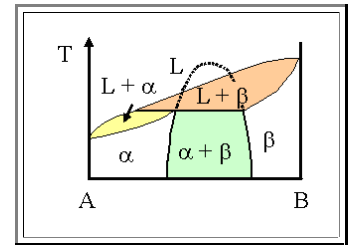
- All that's needed for that is that the melting points of the two components are quite different, so one will be smaller than the equilibrium temperature for the three phases in contact.

● What you get then looks like this:

It is rather straight-forward; even in the details, but a closer discussion would still need a lot of words and drawings.

● The important thing to note is that everything follows from the interaction energy of **A** and **B** atoms (or components, if you allow molecules for **A** and **B**, too).

● Add the entropy of mixing, and you can actually calculate phase diagrams - including rather complicated ones.



Nobody says it's easy - but by now, standard software is available that produces binary phase diagrams routinely.

Stirlingsche Formel

Basics

- Die Stirlingsche Formel ist ein unverzichtbares Hilfsmittel bei allen kombinatorischen und statistischen Formeln; sie ermöglicht mit **Fakultäten** einfach zu rechnen.
- Sie existiert in **mehreren** Versionen, die verschiedene Genauigkeitsgrade darstellen. Sie ist relativ leicht in einfacher Form ableitbar:

Es ist

$$\ln x! = \ln 1 + \ln 2 + \ln 3 + \dots + \ln x$$

$$\ln x! = \sum_{y=1}^x \ln y$$

mit y = die ganzen positive Zahlen beginnend bei 1.

- Für große y kann man statt der Summe näherungsweise ein Integral nehmen, es gilt $\ln y \approx \int \ln y \cdot dy$ (von 1 bis x). Es gilt

$$\sum_{y=1}^x \ln y \approx \int_1^x \ln y \cdot dy$$

$$\int_1^x \ln y \cdot dy = y \cdot \ln y - y$$

Nach Einsetzen der Integrationsgrenzen erhält man

$$\ln x! \approx \int_1^x \ln y \cdot dy = y \cdot \ln y - y \Big|_1^x = x \cdot \ln x - x + 1$$

- Das ist die **einfache** und leicht zu verstehende Version der Stirlingformel.

Für sehr große x kann man auch noch den Term $x + 1$ gegenüber $x \cdot \ln x$ vernachlässigen und erhält die ganz simple und in der Regel verwendete Version

$$\ln x! \approx x \cdot \ln x$$

- Damit hat man aber nicht nur eine numerische Näherung gemacht, sondern aus einer **diskreten** Funktion, die nur für **ganze positive** Zahlen definiert ist und als Ergebnis auch immer nur ganze positive Zahlen haben kann, eine **kontinuierliche** Funktion gemacht, die für **alle** Zahlen ausgerechnet werden kann, wobei aber offen bleibt, was der Wert für z.B. **3,73!** bedeutet.

Das hat Konsequenzen, z.B. den bei der Herleitung der Gaußverteilung verbundenen Übergang von **absoluten** Wahrscheinlichkeiten zu **Wahrscheinlichkeitsdichten**.

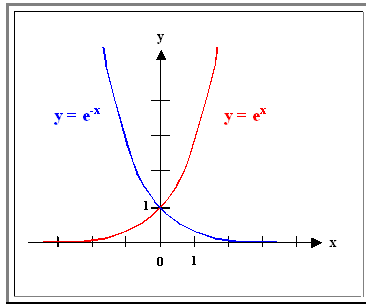
- Eine noch genauere Näherung, die aber nicht mehr leicht herleitbar ist und schon für $x \leq 10$ ganz gut ist, gibt die folgende Version der Stirlingschen Formel

$$\ln x! \approx \ln(2\pi^{1/2}) + (x + 1/2) \cdot \ln(x) - x$$

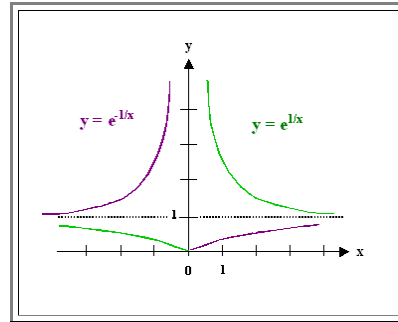
Working with Exponentials and Logarithms

Basics

First, the graphical representation of the most important exponential curves (see [math script](#) as well)

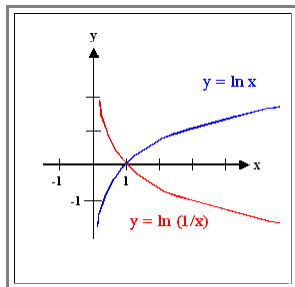


- The typical curves everybody should know. The blue curve in the first quadrant (positive x values) corresponds to the *energy dependence* of the ubiquitous **Boltzmann factor** $\exp - (E/kT)$



- Slightly more tricky. Note that the purple branch in the 1. quadrant corresponds to the *temperature dependence* of the ubiquitous Boltzmann factor $\exp - (E/kT)$

The inverted functions, e.g. $y = \ln x$ are easily pictured, too; below the $y = \ln x$ and the $y = \ln (1/x)$ functions are shown.



- The graphs, in case you forgot, also illustrate some basic algebraic relations, e.g.

- $e^{-x} = 1/e^x$
- $\ln x = -\ln (1/x)$

The essential identities are

$$\begin{aligned} e^x &= \frac{1}{e^{-x}} & (e^x)^y &= e^{x \cdot y} \\ e^x \cdot e^y &= e^{x+y} & (e^x)^{1/y} &= e^{x/y} \\ \frac{e^x}{e^y} &= e^{x-y} & e^{\ln x} &= x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln (x \cdot y) &= \ln x + \ln y \\ \ln \frac{x}{y} &= \ln x - \ln y \\ \ln x^y &= y \cdot \ln x \end{aligned}$$

Here some approximations.

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

$$\begin{aligned} \ln (1+x) &= x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots \\ \ln (1-x) &= - \left(x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4} + \dots \right) \end{aligned}$$

While many equations contain exponential terms of some variable which "disappear" if you substitute the \ln of the variable (as in the **Arrhenius plot**), we mostly prefer the \lg of some observable quantity to the \ln . As an example, plotting the [vacancy concentration](#) c_v in an Arrhenius plot would be straight forward with the \ln :

- On order to get a straight slope we have to switch to new variables according to

$$c_V = A \cdot \exp - \frac{H_V}{kT}$$

$$\ln c_V = \ln A - \frac{H_V}{kT} \cdot \frac{1}{T}$$

$$y = \ln A - \frac{1}{T} \cdot x$$

for

$$y = \ln c_V \quad x = \frac{1}{T}$$

- For y and x we get straight line with slope $-H_V/k$ and intercept $= A$

What do we have to do if we want to plot **lg** (c_V) instead of \ln (c_V)?

- We have to multiply everything with **lg e = 0,4342..**, because

$$\lg x = (\lg e) \cdot (\ln x) \quad 1)$$

- We obtain

$$\lg (c_V) = 0,434 \cdot \ln A - 0,434 \cdot \frac{H_V}{k} \cdot \frac{1}{T}$$

1) If this puzzles you, consider

- We postulate the equality

$$\lg x = M \cdot \ln x$$

- and want to find a value for **M**. Raising everything to the power of **10** gives

$$10^{\lg x} = x = 10^{M \cdot \ln x}$$

- This equation can only be fulfilled if

$$10^M = e$$

- because then we have $e^{\ln x} = x$ as required, giving **M = lg e**

Combinatorics

Basics

Das ist ein Modul aus dem ["Defects" Hyperscript](#), der aber hier auch sehr gut paßt.

Here we just look at the different ways to generate **combinations** or **variations** of "things" (= *elements*) belonging to a certain set of things.

The *set of "things"* could be the numbers $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$; the letters of the alphabet; the atoms of a crystal; the people on this earth, in Europe, or in your hometown - you get the drift. We generally assume that the complete set has N such elements. The elements can be different or identical - the set $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ has 5 different elements, the set $\{1, 1, 1, 1, 1\}$ has 5 identical elements, for example.

We then define *subsets* $\{k\}$ that contain k elements from the set $\{0 \dots 9\}$; eight letters, a certain number n of atoms, and ask what kind of combinations or variations are possible between N and k .

Note that we do *not* primarily ask what you can *do* with k elements after you made a choice.

To make that clear: If we have, for example, $N = \{0, 1, 2, \dots, 9\}$, and $k = 3$, we may ask: How many possibilities are there to pick three members of N ? That's a "legal" question. However, we do *not* first ask: How many different numbers can I form with the subset $\{2, 4, 5\}$?

That seems to be a good question, so why don't we allow it? Because the set $\{k\} = \{2, 4, 5\}$ has no relation anymore with $\{N\}$. How many numbers you can form with the integers 2, 4, 5 is completely independent of $\{N\}$; so it is not an eligible question if want to look at relations between $\{N\}$ and $\{k\}$. This does *not* mean that we can not answer the question of how many numbers..., too - if we phrase it correctly, that is!

This is a bit abstract, so let's look at examples:

For the first example we may ask:

- How many possibilities do we have to pick three elements from set $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$ allowing everything. This *also* would answer the question of how many general three-digit numbers including "numbers" that start with "0", e.g. 043 we could make.
- How many possibilities do we have to pick three elements from set $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$ if we always pick different elements.
- How many possibilities do we have to pick three elements from set $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$ while counting all different arrangements of the same elements as identical (i.e. 123; 231; 312, ...are not counted as different subsets).

It is obvious: Even for the most simple examples, there is no end of questions you can ask concerning possible arrangements of your elements.

Some answers to possible questions are rather obvious, some certainly are not. For some, you might feel that given enough time you would eventually find the answer; some you might feel are hopeless - just for you, or possibly for everybody?

Moreover, for some answers you have a *feeling* or some rough idea of what the result could be. It's just clear that all problems involving three digits have less than 1.000 possibilities, and that with more restrictions the number of possibilities will decrease. For other problems, however, you may not have the faintest idea of what the result might be. That is a big problem and makes combinatorics often very abstract.

How to be systematic about this? That is an easy question: Study *combinatorics* - a mathematical discipline - for quite some time and you will find out.

In particular you will find out that there is a small number of *standard cases* that include many of the typical questions we posed above, and that there are standard formulas for the answers. Let's summarize these standard cases in what follows.

Quite generally, we look at a situation where we have N elements and ask for the number of arrangements we can produce with k of those elements.

Some Examples:

- The elements are the natural numbers $\{0, 1, 2, \dots, 9\}$; i.e. $N = 10$. With $k = 3$ we now ask how many different strings = different *numbers* we can form with 3 of those elements.
- The elements are two different things (e.g. ♠ and ♥, yes and no, place occupied, place free, ...) How many different strings (or other arrangements) consisting of $k = 6$ elements can you form (e.g. ♠♥♥♠♠♥; ♥♥♥♠♥♠, and so on)?
- The elements are N coins all lined up and with face up. How many *different strings* can you form if you flip k coins over?

The questions we ask, however, are not yet specific enough to elicit a definite answer. We have to construct $2 \times 2 = 4$ general cases or groups of questions.

First we have to distinguish between two basic possibilities of selecting elements for the combinatorial task:

1. We only allow **different** elements. We pick, e.g. 2 or 9 of the 10 given elements 0, 1, 2, ..., 9; or generally k **different** elements. Obviously $k \leq 10$ applies. For $k = 3$, we may thus pick {1,2,3}, or {0, 5,7}, but **not** {1,1,2} or {3,3,5}. However, it just means that you can pick a given element only once. If we look at the set $\{N\} = \{1,1,1,2,3,4\}$ and have $k = 4$, we may select the sets {1,1,1,3}, or {1,1,2,4}, because $\{N\}$ contains three "1's", but not, e.g., {1,1,1,1}.
2. We allow **identical** elements. Again we pick k elements, but we may pick any element as often as we like, at most, of course, k times. If we work with $\{N\} = \{1,2,3, \dots, 9\}$ and three elements, we now might use {1,1,1}, {1,1,2}, {1,2,2}, {1,2,3}, while only {1,2,3} would have been allowed in the case of **different** elements from above

Second, we have to distinguish between possibilities of **arranging** the elements. An **arrangement** in this sense, simply speaking, can be anything that allows to visualize the combinations we make with the elements selected - e.g. a string as shown above. We then have two basic possibilities:

1. **Different** arrangements of the same elements count as **different** combinations/variations. (1,3,2) thus is a string different from (3,1,2) if we work with different elements from the {0,1,2,3,...,9} set. Likewise, (1,1,3) is a string different from (1,3,1) if identical elements are allowed.
2. **Different** arrangements of the same elements do **not** count as different combinations/variations. (1,2,3), (3,1,2), (2,1,3), (2,3,1), and so on, then would all count as **one** case or string. Note that it does not matter, if the arrangements are **really** indistinguishable or not, but only if what the encode is indistinguishable. For example, the string 123, interpreted as the **number** hundred-twenty-three, is certainly distinguishable from 312, but both strings would be indistinguishable arrangements if, e.g., interpreted as the sequence of arranging electrons (132 = take an electron from the first atom, then one from the third and finally one from the second and put them "in a box").

Sticking to natural numbers as elements of the set $\{N\}$ for examples, we now can produce the following table for the four basic cases:

Case Distinction			
We must select different elements		We may select identical elements.	
Different arrangements of the same elements count. ("Distinguishable arrangements")	Different arrangements of the same elements do not count ("Indistinguishable arrangements")	Different arrangements of the same elements count.	Different arrangements of the same elements do not count.
We ask for the number of possible Variations $V^D(k, N)$	We ask for the number of possible Combinations $C^D(k, N)$	We ask for the number of possible Variations $V^I(k, N)$	We ask for the number of possible Combinations $C^I(k, N)$
$C^D(k, N) = \frac{N!}{(N-k)!}$ $= \binom{N}{k} \cdot k!$	$C^I(k, N) = \frac{N!}{(N-k)! \cdot k!}$ $= \binom{N}{k}$	$V^D(k, N) = N^k$	$V^I(k, N) = \frac{(N+k-1)!}{(N-1)! \cdot k!}$ $= \binom{N+k-1}{k}$
Examples			
$N = \{1,3,4,5\}$ $k = 3$ All 3-digit numbers with different elements 134, 143, 135, 153, 145, ... $C^D(k, N) = 4!/1! = 24$	$N = \{1,3,4,5\}$ $k = 3$ 3-digit numbers with different elements and only one combination 134, 135, 145, 345 $C^D(k, N) = 24/k! = 24/6 = 4$	$N = \{0,3, \dots, 9\}$ $k = 3$ All 3-digit numbers 000, 001, ..., 455, ... , 999 $V^D(k, N) = 10^3 = 1000$	$N = \{1,3,4, \}$ $k = 2$ All 2-digit numbers with only one combination 11, 12, 22, 13, 23, 33 $C^D(k, N) = 4!/2! \cdot 2! = 6$

Since the fraction marked in red comes up all the time in combinatorics, it has been given its own symbol and name.

We define the **binomial coefficient** of N and k as

$$\binom{N}{k} = \text{Binomial coefficient} = \frac{N!}{(N-k)! \cdot k!}$$

- Yes - it is a bit mind boggling. But it is not quite as bad as it appears.
- The first column gives an obvious result. How many three digit numbers can you produce if you have **0 - 9** and every possible combination is allowed (i.e., **001 = 1** etc.) and counted. Yes - all numbers from **000, 001, 002, ..., 998, 999** - makes exactly **1000** combinations, or $C^D(k, N) = 10^3$ as the formula asserts.
 - Always ask yourself: Am I considering a *variation* (all possible arrangement counts) or a *combination* ("indistinguishable" [1](#) arrangements don't count separately)?
 - Look at it from the *practical* point of view, not from the *formal* one, and you will get into the right direction without too much trouble.
 - The rest you have to take on faith, or you really must apply yourself to combinatorics.
 - All more complicated questions not yet contained in the cases above - e.g. we do not allow the element "0" as the first digit, we allow one element to be picked k_1 times, a second one k_2 times and so on, may be constructed by various combinations of the **4** cases (and note that I don't say "*easily* constructed").

Arrangement of Vacancies

- OK. For the example given the cases may be halfway transparent. But how about the *arrangement of vacancies in a crystal*? What are the elements of this *combinatorial* problem, and what is k ?
- The elements obviously are the N atoms of the crystal. The subset k equally obviously selects $k = n_v = \text{number of vacancies}$ of these elements.
 - Now what exactly is the question to ask? There are often many ways in stating the same problem, but one way might be better than others in order to see the structure of the problem.
 - We could ask for example:
 - How many ways do we have to arrange n_v vacancies in a crystal with N atoms? That's the question, of course, but it just does not go directly with the math demonstrated above.
 - How many digital numbers can we produce with $N - n_v$ "1's" and n zeros? Here we simply count the vacancies as zero's. Good question, but still not too clear with respect to the cases above
 - We have N *numbered* atoms. How many possibilities do we have to select n_v *different* elements? Moreover, we don't care about the arrangement of the atoms taken out, all "numbers" we could produce with the numbered atoms we have taken out counts as *one* arrangement.
 - It is clear now that we have to take the "*identical elements*" and "*different arrangements of the same elements do not count*" case - which indeed gives us the correct formula that we derived from scratch in [exercise 2.1-4](#)

1) There is a certain paradoxon here: In order to explain *in words* that certain arrangements are *indistinguishable*, we have to list them separately, i.e. we distinguish them. But that is not a real problem, just a problem with words.

Temperatur und Druck

Vorbemerkungen

- Eigentlich genügt ein Satz, um das Wesen der Wärme und anderer abgeleiteter Größen wie Temperatur, Druck etc. zu beschreiben:

Innere Energie ist ungeordnete (Teilchen)bewegung
die Betonung liegt auf ungeordnet!

Basics

- Der Rest ist Mathematik, insbesondere Statistik. In der Physik hat sich die **Wärmelehre** jedoch anders entwickelt; es gab sie schon in recht weit entwickelter Form, bevor es Teilchen in der Form von Atomen und Molekülen "gab".
- Seit obiger Satz als die Basis aller der mit den Begriffen Wärme, Temperatur und Druck verknüpften Erscheinungen erkannt wurde, nennt man die alte Wärmelehre modern "**Thermodynamik**", oder genauer "**statistische Thermodynamik**". (Wie die innere Energie mit der Wärme, der Temperatur und dem Druck zusammenhängt, wird weiter unten erläutert.)
- Für lange Zeit war die Thermodynamik im wesentlichen auf **Gase** bezogen. Für Gase läßt sich obige Aussage leicht nachvollziehen, für Festkörper muß man schärfer nachdenken.
- Die Moleküle oder Atome - allgemein die Teilchen - eines **Gases** fliegen völlig ungeordnet durcheinander und wechselwirken nur über **elastische** Stöße. Ein Modell mit perfekten Kugeln kommt der Realität ziemlich nahe.
 - Eine **geordnete** Bewegung eines Gases in einem Kasten gibt es nicht, es sei denn, daß man den ganzen Kasten bewegt, in dem das Gas eingesperrt ist. Dann überlagert sich die geordnete Bewegung - d.h. alle Teilchen haben dieselbe vektorielle Geschwindigkeit - zur immer noch vorhandenen ungeordneten Bewegung. Für die im Kasten vorhandene Energie ist das aber nach obigem Satz egal.
- Ein Festkörper aber, so scheint es, führt nur **geordnete** Bewegungen aus. Bewegt sich ein Atom in eine bestimmte Richtung, machen alle anderen notgedrungen dieselbe Bewegung - sonst bricht der Körper auseinander. Das ist zwar prinzipiell richtig, aber es gibt trotzdem auch noch eine **ungeordnete** Bewegung im Festkörper:
- Die ungeordnete Bewegung in Festkörpern resultiert aus den **Oszillationen** der Atome um ihre Gleichgewichtslage. Die Unordnung besteht darin, daß sich die Amplitude (in alle drei Raumrichtungen) und (in Maßen) die Frequenz eines einzelnen Atoms ständig und unsystematisch ändern - es gibt nur eine statistische Verteilung dieser Größen, eine Vorhersage für einen Einzelfall ist nicht möglich.
- Mit diesem Basiswissen bewaffnet, lassen sich **Temperatur** und **Druck**, die Grundgrößen der **Thermodynamik**, relativ leicht definieren.

Temperatur

- Die **Temperatur** eines Körpers ist ein Maß für die Energie der **ungeordneten** Bewegung der Teilchen, aus denen der Körper besteht.
- Damit müssen wir zunächst die diversen Möglichkeiten ungeordneter Bewegung diskutieren.
- Für ein **einatomiges Gas** ist die Sache am übersichtlichsten; man kann obigen Kernsatz sofort als Formel hinschreiben. Es gilt offensichtlich:
- Gesamtenergie der ungeordneten Bewegung = **E = const.** (es gilt der Energieerhaltungssatz), und da die gesamte Energie nur in der (ungeordneten) kinetischen Energie der Atome stecken kann, gilt zudem:

$$\text{Mittlere Energie eines Atoms} = \langle E_{\text{Atom}} \rangle = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \langle \underline{v}^2 \rangle$$

- Wir benutzen für kurze Zeit den Unterstrich, um **v** als **Vektor** eindeutig zu kennzeichnen.
- Dabei ist wichtig, daß über das **Quadrat** der momentanen Geschwindigkeit gemittelt wird. Denn $\langle \underline{v}^2 \rangle$ ist **ungleich** $\langle \underline{v} \rangle^2$ (mal mit zwei Zahlen ausprobieren oder den [Link](#) studieren). Für unser Gas gilt sogar $\langle \underline{v} \rangle^2 = 0$, denn $\langle \underline{v} \rangle$ **muß** = 0 sein, weil unser Atom im Laufe der Zeit mit gleicher Wahrscheinlichkeit in alle Richtungen fliegt und der Mittelwert von $+\underline{v}$ und $-\underline{v}$ = 0 ergibt.
- Die Temperatur **T** ist dann folgendermaßen definiert:

$$\langle E_{\text{Atom}} \rangle = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \langle v^2 \rangle =: \frac{3}{2} k \cdot T$$

- Die Größe **k** tritt hier als Proportionalitätskonstante auf, sie heißt **Boltzmann-Konstante**. Man braucht sie, damit die hier definierte Temperatur mit der "klassischen" Temperatur der Kelvin-Skala übereinstimmt. Die **Boltzmann-Konstante** hat den Zahlenwert $k = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$. Sie ist eine der fundamentalen physikalischen Konstanten des Universums.

- Der Faktor **3/2** hat eine spezifische Bedeutung, die sofort klar werden wird.

➤ Betrachten wir jetzt ein **zweiatomiges Gas**.

- Ungeordnete Energie kann wie beim einatomigen Gas in der **Translationsbewegung** des Schwerpunktes liegen (**3** Möglichkeiten für die drei Raumachsen), aber auch in **Rotationsbewegungen** (**2** Möglichkeiten für die zwei Achsen senkrecht zur Verbindungslinie der Atome).
- Dagegen ist die Verbindungslinie der Atome **keine** Rotationsachse des zweiatomigen Moleküls. (Bitte selber kurz darüber nachdenken, warum das so ist!)
- Darüberhinaus kann das Molekül noch **schwingen**.
- Jede dieser **unterscheidbaren** Möglichkeiten Energie aufzunehmen, heißt **Freiheitsgrad f** des Systems. Jeder Freiheitsgrad eines Systems kann unabhängig von den anderen Energie aufnehmen.

➤ Ein wichtiger Satz der klassischen statistischen Thermodynamik (der **Äquipartitionssatz** oder **Gleichverteilungssatz**) sagt nun, daß die verfügbare Energie (das ist die ungeordnete Gesamtenergie des Systems) sich auf alle Freiheitsgrade des Systems **gleich** verteilt.

- In anderen Worten: In jedem Freiheitsgrad steckt (im Mittel) gleich viel Energie $\langle E_{\text{FG}} \rangle$, und für $\langle E_{\text{FG}} \rangle$ gilt

$$\langle E_{\text{FG}} \rangle =: \frac{1}{2} k \cdot T$$

- Damit gilt für die mittlere Energie eines Teilchens in einem "Ensemble" (z.B. Atome, Moleküle, Basis eines Kristalls, usw.) eine sehr wichtige allgemeine Beziehung:

$$\langle E_{\text{Teilchen}} \rangle = \frac{1}{2} \cdot f \cdot k T$$

➤ So weit, so gut. Die große Überraschung für die frühen Thermodynamiker war, daß die Formel **oft nicht stimmte!** Ein zweiatomiges Gas hat mindestens (noch ohne die Schwingungen) **5** Freiheitsgrade; es benimmt sich aber meist so, als ob es nur **3** hätte.

- Das läßt sich leicht messen durch die Bestimmung der **spezifischen Wärme c** einer Substanz.
- Weiß man, wieviele Teilchen das gegebene System umfaßt, weiß man auch, wieviel **innere Energie** in ihm steckt - man braucht ja nur über die mittlere Energie der Teilchen zu summieren.
- Hat der Körper die Masse **M** und liegt die Teilchenmasse bei **m**, enthält er offenbar **M/m** Teilchen; damit muß die mittlere Energie multipliziert werden, um den gesamten ungeordneten Energieinhalt zu bekommen.
- Wir definieren zunächst die Wärmekapazität **C** als den Quotienten der Änderung des Energieinhalts eines Körpers ($= \Delta E$) geteilt durch die dazu notwendige Änderung der Temperatur ΔT :

$$C = \frac{\Delta E}{\Delta T} = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k$$

- Dividiert man durch die Masse **M** des Körpers, erhält man die spezifische Wärmekapazität **c**; sie ist **c = f · k / (2m)**.

➤ Ein einfaches Ergebnis, das leicht überprüft werden kann, da die spezifische Wärme einfach zu messen ist. Es besagt insbesondere, daß

- die spezifische Wärme proportional zur der Zahl der Freiheitsgrade ist, und daß
- die spezifische Wärme umgekehrt proportional zur Teilchenmasse (i.d.R. also Atommasse) ist. Beziehen wir sie nicht auf eine Masseneinheit, sondern auf **1 mol** einer Substanz, ist sie für alle Körper eine Konstante mal der Zahl der Freiheitsgrade. In Zahlen ausgedrückt, gilt

$$c_{\text{mol}} = f \cdot 4,15 \text{ mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

- Das ist die Regel von **Dulong** und **Petit**.

Wir müssen mal kurz innehalten, um uns der Ungeheuerlichkeit dieser Sache bewußt zu werden:

- Wir behaupten nicht mehr und nicht weniger, als daß eine der wichtigsten Eigenschaften **aller** Materialien - Gase, Flüssigkeiten, Festkörper aller Arten (wir sind hier nicht auf Kristalle beschränkt!), einfach **alles** -, eine extrem einfach zu berechnende Größe ist, in der nur die Art der Atome (über die Mol-Definition) und ihre allgemeine gegenseitige Beziehung (über die Freiheitsgrade) eingeht! Sonst nichts!
- Das ist schon gewaltig! Schauen Sie um sich: Was immer Sie sehen - das Wasser im Glas, das Glas, die Luft, aber auch die Freundin oder den Freund, die Topfpflanze, der Stuhl: Die spezifische Wärme dieser und aller anderen Materialien birgt kein Geheimnis mehr; es ist glasklar, was dahintersteckt und wie es zu berechnen wäre.
- Und das alles bekommt man durch die harmlose Definition der uns so vertrauten Temperatur als Maß für die im Körper steckende ungeordnete Energie.

Daß die Formel experimentell oft nicht stimmte, war unerklärlich; sie war definitiv richtig.

- Wir haben hier einen der berühmten [Stolpersteine der klassischen Physik](#) zu Beginn des **20.** Jahrhunderts, der erst mit der Quantentheorie restlos beseitigt werden konnte.

Es fehlt noch der Bezug zum Begriff "Wärme":

- Ohne daß wir es explizit gesagt haben, haben wir bei der Definition der Wärmekapazität auch definiert, was "Wärme" ist - nämlich die Energie, die man man auf einen Körper überträgt (oder ihm entzieht), wenn man seine Temperatur durch Heizen oder Kühlen ändert.
- Die Einschränkung "durch Heizen oder Kühlen" ist wichtig, weil man die Temperatur eines Körpers auch anders ändern kann; unter diesen anderen Möglichkeiten gibt es z.B. einen Prozeß, bei dem gar keine Wärme übertragen wird (auf schlaue heißt der "adiabatisch").
- Mit einem Wärmeübertrag ist also definitionsgemäß eine Temperaturänderung verbunden - aber nur, wenn sonst nichts anderes geschieht: Wir wissen ja, daß es Wärmekraftmaschinen gibt, die zumindest einen Teil der ihnen zugeführten Wärme in mechanische Arbeit umwandeln können; unter den möglichen Umwandlungsprozessen gibt es einen, der bei konstanter Temperatur abläuft (auf schlaue heißt der "isotherm").

Wir merken gerade, daß es gar nicht so einfach ist, den Begriff "Wärme" allgemeingültig zu definieren.

- Dagegen ist eine wichtige Klarstellung, was Wärme **nicht** ist, ganz einfach: Oben wurde die ungeordnete (Teilchen)bewegung als innere Energie bezeichnet - und nicht als Wärme, denn die ist (wie auch schon oben gesagt) eine davon abgeleitete Größe.
- Das mag auf den ersten Blick verblüffen, denn anschaulich unterscheiden sich ein "warmer" und ein "kalter" Körper ja genau darin, daß sich bei dem einen die Teilchen viel stärker ungeordnet bewegen als bei dem anderen.
- Allerdings beziehen sich "warm" und "kalt" letztlich auf die Temperatur - und die ist ein Maß für die innere Energie; das geht also anschaulich auf.

Entscheidend ist, daß sich "innere Energie" und "Temperatur" auf den momentanen Zustand des Körpers beziehen, "Wärme" dagegen auf eine (wie auch immer geartete) Veränderung des Zustands.

- Ohne weiter in die Details zu gehen, halten wir hier lediglich fest, daß unter Wärme eine übertragene Energiemenge verstanden wird, die keine (wie auch immer geartete) Arbeit ist.

Der Druck

Was ist Druck? Kraft pro Fläche; in Ordnung. Aber woher kommt die Kraft, die auf die Innenseite der Fläche eines Körpers drückt, wenn darin ein Gas eingesperrt ist? Und warum nimmt sie zu, sobald die Temperatur erhöht wird?

- Einfach: Teilchen des Gases werden gelegentlich auf die Wand prallen, dort (per Stoßgesetz) reflektiert werden und dabei ihren **Impuls** $\underline{p} = m\underline{v}$ (aber nicht die Energie $\frac{1}{2} m\underline{v}^2$) ändern.
- Die Impulsdifferenz geht an die Wand, und da die **Änderung eines Impulses** eine **Kraft** \underline{F} darstellt, erfährt die Wand fortwährend kurze "Kraftstöße". In Formeln haben wir

$$\underline{F} = m \cdot \underline{a} = m \cdot \frac{d\underline{v}}{dt} = \frac{d(m \cdot \underline{v})}{dt} = \frac{d\underline{p}}{dt}$$

Betrachten wir nicht nur **ein**, sondern **N** Teilchen, die mit der Dichte **n** das Volumen **V_0** bevölkern (d.h. **$N = n \cdot V_0$**), müssen wir für den Druck den Gesamteffekt aller Teilchen betrachten.

- Ständig knallen Teilchen gegen jede beliebige Wand, die wir uns vorstellen können. Jedesmal ergibt es einen kurzen Kraft/Druckstoß; falls wir genügend viele Teilchen haben, z.B. **$6 \cdot 10^{23}$** in irgendeinem Mol Gas, werden im Mittel pro Zeiteinheit ziemlich viele **und** ziemlich genau gleichviele Stöße stattfinden - wir beobachten einen **konstanten Druck**.

Wieviele Teilchen knallen denn pro Zeiteinheit **t** auf eine Wand mit der Fläche **A** , die z.B. senkrecht zur **x** -Achse des Koordinatensystems steht?

- Einfach: Alle, die es innerhalb **t** schaffen, von ihrem derzeitigen Aufenthaltsort bis zur Wand zu kommen, d.h. alle, die in einem Abstand **$s = v_x \cdot t$** zur Wand zu finden sind. **v_x** ist dabei die **x** -Komponente der Teilchengeschwindigkeit **\underline{v}** .
- In anderen Worten: Es sind alle Teilchen in dem Volumen **$V_x = A \cdot s = A \cdot v_x \cdot t$** . Mit der gegebenen Dichte **n** haben wir damit:

$$\text{Zahl Stöße auf Wand pro } t = \frac{n \cdot V_x}{t} = \frac{n \cdot A \cdot v_x \cdot t}{t} = n \cdot A \cdot v_x$$

Bei jedem Stoß wird das Teilchen reflektiert, d.h. **v_x** ändert sich zu **$-v_x$** ; der Impuls entsprechend von **$m \cdot v_x$** auf **$-m \cdot v_x$** . Die gesamte Impulsänderung **dp/dt** ist also **$2 \cdot m \cdot v_x$** pro Teilchen.

- Die gesamte auf die Wand in der Zeiteinheit **t** ausgeübte Kraft ist als

$$\begin{aligned} F &= \text{Zahl stoßender Teilchen} \cdot \text{Impulsänderung pro Teilchen} \\ &= n \cdot A \cdot v_x \cdot 2 \cdot m \cdot v_x \end{aligned}$$

Der Druck **p** ist nun **Kraft pro Fläche**, falls wir unsere Gleichungen so nutzen, wie sie sind, erhalten wir

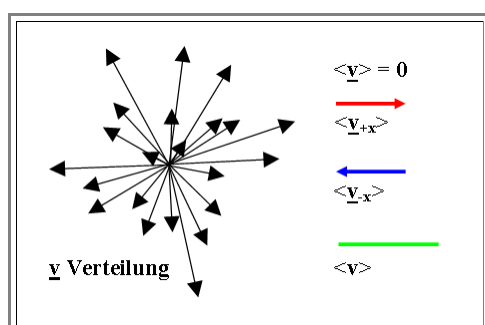
$$p = \frac{F}{A} = 2 \cdot n \cdot m \cdot v_x^2$$

- Das war jetzt etwas zu naiv - es steckt noch eine Ungenauigkeit in der Sache, über die man schon mal nachdenken kann; wir kommen gleich drauf.

Trotzdem nicht schlecht; bleibt nur noch zu klären, was genau **v_x^2** in diesem Zusammenhang bedeutet.

- Denn die realen Teilchen haben eine **Verteilung von Geschwindigkeiten**, sowohl nach **Richtung** als auch nach **Betrag**. Unser **v_x** muß damit ein sinnvoll definierter **Mittelwert** sein.
- Die notwendigen Mittelwertbildungen sind durchaus ein bißchen trickreich; wie genau man hier mittelt, ist in **einem eigenen Modul** im Detail erklärt. Hier eine Kurzversion:

Wir gehen davon aus, dass alle Richtungen für **\underline{v}** gleich wahrscheinlich sind; und für die Beträge gibt es irgendeine Verteilung mit einem Maximum (eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung, um genau zu sein). Das sieht dann schematisch so aus wie unten links gezeigt.



- Mittelt man über die vektorielle Geschwindigkeit **\underline{v}** , bekommt man als Mittelwert **$\langle \underline{v} \rangle = 0$** . Das sieht man sofort, falls man sich alle Geschwindigkeitsvektoren von einem gemeinsamen Nullpunkt aus aufgetragen denkt wie links gezeigt.
- Betrachten wir aber **nur** den vektoriellen Mittelwert in die **spezielle $+x$** Richtung, fällt die Hälfte aller Vektoren erstmal weg, den ihre Komponente in die gewünschte **allgemeine** Richtung hat das falsche Vorzeichen

- Das ist zum Beispiel für unser \mathbf{v}_x wichtig, denn nicht nur die Teilchen in **positive** x -Richtung üben Druck aus, sondern auch die in **negative** x -Richtung. Sie würden eine Platte, die einfach nur so in einem Gas hängt, auf der **anderen** Seite treffen und damit einen entgegengesetzt gleichgroßen Druck ausüben - der Gesamtdruck wäre Null. Das ist es, was wir oben naiv übersehen haben.
- Der Mittelwert $\langle \mathbf{v} \rangle$ der **Beträge aller** Geschwindigkeiten ist natürlich ein Skalar; sein Zahlenwert ist größer als \mathbf{v}_x , für dessen Bestimmung wir ja die y - und z -Komponent des Vektors "weggeworfen" haben.

Was wir nun als eigentliche Ausgangsgröße haben, ist $\langle \mathbf{v} \rangle$, denn das steckt in der **kinetischen Energie** der Teilchen, die wiederum die Temperatur bestimmt.

- Wie bestimmt sich \mathbf{v}_x , das wir brauchen, aus $\langle \mathbf{v} \rangle$, das wir haben? Das ist relativ einfach auszu-x-en, wir brauchen nur die kinetische Energie anzuschauen, und die läßt sich immer folgendermaßen in die Beiträge der Raumrichtungen aufliedern (mal darüber nachdenken!)

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \cdot \langle \mathbf{v}^2 \rangle = \frac{1}{2} m \cdot (\langle \mathbf{v}_x^2 \rangle + \langle \mathbf{v}_y^2 \rangle + \langle \mathbf{v}_z^2 \rangle)$$

- Dabei ist "natürlich" $\langle \mathbf{v}_x \rangle = 0$, aber $\langle |\mathbf{v}_x| \rangle = \langle |\mathbf{v}_{+x}| \rangle = \langle |\mathbf{v}_{-x}| \rangle = \langle \mathbf{v}_y \rangle = \langle \mathbf{v}_z \rangle$ - wie gesagt: Kurz nachdenken!

Damit gilt nun einfach $\langle \mathbf{v}_x^2 \rangle = \frac{1}{3} \cdot \langle \mathbf{v}^2 \rangle$, und unter Berücksichtigung des zu streichenden Faktors 2 (nötig, um den "Rückseitendruck" auszuschalten), erhalten wir für den Druck auf eine Gefäßwand (d.h. Teilchen prallen nur von **einer** Seite auf):

$$p = \frac{1}{3} \cdot n \cdot m \cdot \mathbf{v}^2 = \frac{2}{3} \cdot n \cdot E_{\text{kin}} = \frac{2}{3} \cdot n \cdot \frac{1}{2} \cdot 3 \cdot kT = n \cdot kT$$

Nimmt man noch dazu, daß folgende simple Beziehungen gelten:

1. Zahl der Teilchen $N = n \cdot V$
2. Zahl z der enthalten Mole = N / A_V (A_V = Avogadrokonstante)
3. $k \cdot A_V$ = Gaskonstante R ,

- erhalten wir nach entsprechender Umformung das **allgemeine Gasgesetz**

$$p \cdot V = z \cdot R \cdot T$$

- Und damit haben wir eigentlich die "Thermodynamik" der Gase hinreichend erschlagen! Nicht schlecht für einen im Grunde sehr einfachen Ansatz!

Und auch wenn das alles beim ersten Durchgang noch etwas verwirrt, ist doch vielleicht klar geworden:

- Die **Natur** von Temperatur und Druck sowie das allgemeine Gasgesetz folgen unmittelbar, und mit im Grundsatz simpelster Mechanik, aus der Primärhypothese:
- Innere Energie ist ungeordnete (Teilchen)bewegung - die Betonung liegt auf ungeordnet!**

Phänomenologische (klassische) Thermodynamik



Basics

Multiple Choice Test zu

5.1.1 Thermodynamisches Gleichgewicht - Allgemeine Bemerkungen

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.1.2 Mechanisches und thermisches Gleichgewicht

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.1.3 Chemisches Gleichgewicht

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.1 Mechanisches, thermisches, chemisches und thermodynamisches Gleichgewicht

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu 5.2.1

Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.3.1 Entropie, freie Energie und freie Enthalpie

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.3.2 Definition der Entropie und erste Anwendung

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.3.3 Gleichgewichtskonzentration von atomaren Fehlstellen in Kristallen

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.3.4 Darstellungen der Konzentrationsfunktion

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5.3 Der 2. Hauptsatz der Thermodynamik

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

5. Thermodynamisches Gleichgewicht

Start Multiple Choice

Übung 5.2-1

Gleichverteilungssatz in Zahlen

Wie schnell bewegen sich bei Raumtemperatur (immer im Mittel):

- ☐ Die Luftmoleküle im Raum?
- ☐ Die freien Elektronen in einem Metall?








Wie heiß muß ein Wasserstoffgas sein, damit seine Atome im Mittel die Energie **100 keV** haben. Das ist die Energie, die man ungefähr braucht, damit sie die Coulomb Abstoßung überwinden und fusionieren können?



Lösung

Übung 5.3-1:

Anordnungsmöglichkeiten

-  Diese Übung dient nur dazu, einige Grundaufgaben der Kombinatorik zu illustrieren. Zu den konkreten Aufgaben ist jedesmal auch die Verallgemeinerung auf k Socken und N Plätze zu liefern
-  Der [Link](#) bietet Hilfestellung.
-  1. Wieviel Möglichkeiten gibt es, $k = 10$ *unterscheidbare* Socken auf $N = 20$ Plätze zu verteilen? Dabei darf auf jedem Platz nur *ein* Socken liegen!
 -  2. Wieviel Möglichkeiten gibt es, $k = 10$ *unterscheidbare* Socken auf $N = 20$ Plätze zu verteilen? Dabei dürfen auf jedem Platz *beliebig viele* Socken liegen!
 -  3. Wieviel Möglichkeiten gibt es, 10 *"identische"* Socken auf 20 Plätze zu verteilen? Dabei darf auf jedem Platz nur *ein* Socken liegen!
 -  4. Wieviel Möglichkeiten gibt es, 10 *"identische"* Socken auf 20 Plätze zu verteilen? Dabei dürfen auf jedem Platz *beliebig viele* Socken liegen!
 -  5. Was erfordert weniger Zeit: Zehnmal 10 Paar Socken (= 20 Einzelsocken) gleich nach der Wäsche zu sortieren, oder zu warten bis die 100 Paare zusammenkommen?



Lösung

Übung 5.3-2

Gleichgewichtskonzentration an Leerstellen



1 Leite die nachstehende Formel für die Gleichgewichtskonzentration von Leerstellen in einem Kristall her.

$$c_v = \text{Konzentration von Leerstellen} = \exp - \frac{H_f(V)}{kT}$$



Beginne mit den Formeln in Script, benütze die [Näherungen](#).



Hinweis: Die Aussage, daß $N - n \approx N$, heißt noch lange nicht, daß $dN - n/dn \approx dN/dn = 0$!!.





2. **Für Spezialisten:** Würden kompliziertere Versionen der [Stirlingformel](#) bessere Ergebnisse liefern?



[Lösung](#)

Übung 5-4: Hebelgesetz

 One really should do an exercise for this. So, as an exercise:

-  Come up with sensible exercise questions and do it!



Lösung

Lösungen zur Übung 5.2-1

Gleichverteilungssatz in Zahlen

Illustration

1. Wie schnell bewegen sich bei Raumtemperatur (immer im Mittel) die Luftmoleküle (d.h. Sauerstoff- und Stickstoffmoleküle) im Raum?

Die Beziehung zwischen innerer Energie und Temperatur [ist](#)

$$E = \frac{1}{2} \cdot f \cdot kT$$

Dabei ist die [Zahl der Freiheitsgrade für unsere zweiatomigen Moleküle](#) $f = 5$, aber nur **3** davon sind in der Translation enthalten

Damit gilt:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{3kT}{2}$$

$$v = \left(\frac{3kT}{m} \right)^{1/2} = \left(\frac{8,6 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \text{ eV} \cdot \text{K}}{30 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ K} \cdot \text{kg}} \right)^{1/2} = 7,17 \cdot 10^{11} \left(\frac{\text{eV}}{\text{kg}} \right)^{1/2}$$

Raumtemperatur ist wie immer **300 K**, und die Massen von **O₂** und **N₂** kann man zu $2 \cdot 16 = 32$ bzw. $2 \cdot 14 = 28$ mal der [Masse eines Protons](#) $u = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Nehme wir also großzügig im Mittel **= 30 u** an.

Das Ergebnis hat noch ein Problem: Die Dimension $[(\text{eV}/\text{kg})^{1/2}]$ sieht noch nicht so gut aus. Das liegt daran, dass wir die klassische Energieeinheit $[\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2] = [\text{J}]$ mit der atomaren Einheit **[eV]** gemischt haben.

Wir müssen also **eV** to **J** konvertieren (der [Link](#) hilft im Zweifel). Wir haben $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ und erhalten damit

$$v = 7,17 \cdot 10^{11} \cdot \left(\frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ kg} \cdot \text{m}^2}{\text{kg} \cdot \text{s}^2} \right)^{1/2} = 286 \text{ m/s}$$

Jetzt sollten ein paar Glöckchen klingeln: Das ist offenbar die **Schallgeschwindigkeit!**

Zufall? Bestimmt nicht! Mal darüber nachdenken.

2. Wie schnell bewegen sich bei Raumtemperatur (immer im Mittel) die freien Elektronen in einem Metall?

Die Beziehung zwischen innerer Energie und Temperatur ist dieselbe wie in der Aufgabe oben, nur die Masse ist anders. Wir haben

$$v = \left(\frac{3kT}{m_e} \right)^{1/2} = \left(\frac{8,6 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \text{ eV} \cdot \text{K}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ K} \cdot \text{kg}} \right)^{1/2} = 5,32 \cdot 10^{13} \left(\frac{\text{eV}}{\text{kg}} \right)^{1/2}$$

$$= 2,13 \cdot 10^4 \text{ m/s}$$

Das ist ein **klassisches** Ergebnis, und es sieht so aus, als ob die Elektronen ganz schön schnell im Metall herumsausen. Tun sie aber nicht, denn die so errechnete Geschwindigkeit ist verglichen mit der wahren (mittleren) Geschwindigkeit viel zu langsam.

- Diese Diskrepanz löst erst die Quantentheorie. Der "Fehler", der in obiger Betrachtung steckt, ist die Verletzung des [Pauli Prinzips](#): Nichts verhindert in unserer Betrachtung, dass zwei Elektronen dieselbe Geschwindigkeit haben könnten, und für "freie" Elektronen wäre das derselbe Zustand. Das darf aber nicht sein.

3. Wie heiß muß ein Wasserstoffgas sein, damit seine Atome im Mittel die Energie **100 keV** haben. Das ist die Energie, die man ungefähr braucht, damit sie die Coulomb Abstoßung überwinden und fusionieren können?

Für die notwendige Temperatur gilt

$$T = \frac{2E}{f \cdot k} = \frac{2E_{\text{kin}}}{3 \cdot k} = \frac{200 \cdot 10^3 \text{ eV} \cdot \text{K}}{3 \cdot 8,6 \cdot 10^{-5} \text{ eV}} = 7,75 \cdot 10^8 \text{ K}$$

- So kommt man zwanglos zu den rund und roh **100 Millionen °C**, die man für die Kernfusion braucht (und bis jetzt noch nicht so richtig hat).

Lösungen zur Übung 5.3-1

Illustration

1. Wieviele Möglichkeiten gibt es, $k = 10$ **unterscheidbare** Socken auf $N = 20$ Plätze zu verteilen? Dabei darf auf jedem Platz nur **ein** Socken liegen!

Das ist noch einfach; wir müssen nur die Zahl der Möglichkeiten "durchdeklinieren".

- Für den ersten Socken haben wir $N = 20$ Möglichkeiten. Für den zweiten Socken gibt es aber nur noch $N - 1 = 19$ Möglichkeiten, da der vom ersten Socken belegte Platz nicht mehr verfügbar ist.
- Wir haben also z.B. den 1. Socken auf Platz 17, und den zweiten Socken auf Platz 4, also die Anordnung (1/17), (2/4). Da die Socken unterscheidbar sind, sind die vertauschten Anordnungen (1/4) und (2/17) **verschieden** und werden extra gezählt.
- Für Socken Nr. 10 bleiben also noch $N - 9 = 11$ Möglichkeiten.
- Insgesamt haben wir

$$P_1(10, 20) = 20 \cdot 19 \cdot 18 \cdot \dots \cdot 11 = 6,70 \cdot 10^{11}$$

- Schon verblüffend, wieviel Unordnung man mit nur 10 Socken in einem kleinen Zimmer erzeugen kann!

Das Problem lässt sich sehr einfach verallgemeinern:

$$\begin{aligned} P_1(k, N) &= N \cdot (N-1) \cdot \dots \cdot (N-(k-1)) \\ &= \frac{\{N \cdot (N-1) \cdot \dots \cdot (N-k+1)\} \cdot \{(N-k) \cdot (N-k-1) \cdot \dots \cdot 1\}}{\{(N-k) \cdot (N-k-1) \cdot \dots \cdot 1\}} \\ &= \frac{N!}{(N-k)!} \end{aligned}$$

Wenn wir in den [Kombinatorik-Modul](#) schauen, stellen wir fest, dass das die Formel zum [folgendem formalisierten Problem](#) ist:

- "We must select **different elements**", and "Different **arrangements of the same elements count**"
- Relativ zum [Beispiel](#) im Kombinatorik-Modul, hätten wir die Frage auch so stellen können: "Gegeben sind die natürlichen Zahlen **1 bis 20**. Wieviel Zahlen kann man durch **10 verschiedene** Elemente dieser Menge bilden?"
- Das Selektieren einer Zahl aus den gegebenen **20** entspricht dann der Platzierung **eines** Sockens auf **einen** Platz, der dann für andere nicht mehr verfügbar ist. Der Socken trägt die herausgegriffene Zahl, ist also von den anderen unterscheidbar.
- Noch einfacher gelingt die "Übersetzung" von der Sockenfrage zum [Zahlenbeispiel im Kombinatorikmodul](#), wenn wir nur **3** Socken auf **10** Plätze verteilen.
 - Die im Beispiel aufgeführten 3-stelligen Zahlen sind dann "Belegungspläne". Der Zahl **153**, zum Beispiel, entspricht dann je ein Socken auf Platz **1**, **5**, und **3**.
 - Dass auch **531** oder **351** als unterscheidbare Fälle zugelassen sind, kommt von der postulierten Unterscheidbarkeit der Socken.

2. Wieviele Möglichkeiten gibt es, $k = 10$ **unterscheidbare** Socken auf $N = 20$ Plätze zu verteilen? Dabei dürfen auf jedem Platz **beliebig viele** Socken liegen!

Das ist sehr einfach:

- Für den 1. Socken gibt es **20** Möglichkeiten, für den 2. Socken auch, usw.
- Insgesamt haben wir

$$P(10, 20) = 20^{10} = 2^{10} \cdot 10^{10} = 1,024 \cdot 10^{13}$$

Die Verallgemeinerung ist klar, wir haben

$$P(k, N) = N^k$$

Im [Kombinatorik-Modul](#) entspricht das dem Fall "*Identical elements, different arrangements count*"

- Die "Übersetzung" in das Beispiel des Kombinatorikmoduls kann man [wie oben](#) machen:
- Den Zahlen **455**, **545**, **554** entsprechen dann zwei Socken auf Platz **5** und einer auf Platz **4**. Dass wir diese drei Variationen zulassen, kommt wiederum von der Unterscheidbarkeit der Socken.

3. Wieviele Möglichkeiten gibt es, **10 "identische"** Socken auf **20** Plätze zu verteilen? Dabei darf auf jedem Platz nur **ein** Socken liegen!

Für den **1.** Socken haben wir **20** Möglichkeiten. Für den **2.** noch **19**.

- Allerdings sind für jede mögliche Anordnung der beide Socken jetzt **2** Anordnungen ununterscheidbar. Falls wir z.B. den **1.** Socken auf Platz **15** legen und den **2.** Socken auf Platz **3**, ist diese Anordnung identisch oder ununterscheidbar vom Fall **1.** Socken auf Platz **3** und **2.** Socken auf Platz **15**.
- Wir haben also nur **(20 · 19)/2** Möglichkeiten für die ersten beiden Socken.
- Das müßte uns jetzt [bekannt vorkommen](#)! Dieses Gesocks entspricht der Grundaufgabe bei der Verteilung von Leerstellen.

Damit haben wir im Speziellen und im Allgemeinen:

$$P_3(10, 20) = \frac{20 \cdot 19 \cdot \dots \cdot 11}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot 10} = 1,84 \cdot 10^5$$

$$P_3(k, N) = \frac{N!}{(N-k)! \cdot k!} = \binom{N}{k}$$

Im [Kombinatorik-Modul](#) entspricht das klar dem Fall "*Identical elements, different arrangements do not count*"

- Die "Übersetzung" in das Beispiel des Kombinatorikmoduls läuft wie in den [vorherigen Fällen](#) und sollte jetzt klar sein.

4. Wieviele Möglichkeiten gibt es, **10 "identische"** Socken auf **20** Plätze zu verteilen? Dabei dürfen auf jedem Platz **beliebig viele** Socken liegen!

Das ist die schwierigste Frage. Offenbar haben wir den Fall "*Identical elements, different arrangements do not count*"

- Am besten startet man mit der "Übersetzung" wie in den drei [vorherigen Fällen](#). Dann ist klar, dass der *Identical elements, different arrangements do not count* Fall der richtige ist.

Die allgemeine Formel ist dann

$$P_4(k, N) = \frac{(N + k - 1)!}{(N - 1)! \cdot k!}$$

$$P_4(10, 20) = \frac{29!}{9! \cdot 10!} = 6,71 \cdot 10^{18}$$

Das sind schon eine Menge Möglichkeiten!

5. Was erfordert weniger Zeit: $N = 10$ Paar Socken (= 20 Einzelsocken) gleich nach der Wäsche zu sortieren, oder zu warten, bis 100 Paare zusammenkommen?
- Wir schaffen jetzt nicht mehr Unordnung, sondern Ordnung. Dazu gehen wir systematisch vor. Wir schauen also nicht auf den Sockenhaufen und versuchen, die passenden Socken direkt zu erkennen, sondern:
- Wir nehmen einen beliebigen 1. Socken und vergleichen ihn mit allen anderen. Falls wir mit $N = 10$ Paaren starten, müssen wir dazu maximal $k_1^{\max} = 2N - 1 = 19$ Arbeitsschritte machen.
 - Es könnte nun natürlich sein, dass der gesuchte Kollege schon beim 3. oder 17. Vergleich auftaucht, wir also nicht alle 19 durchklappen müssen. Im Mittel müssen wir wohl nur die Hälfte der verbliebenen Socken checken. Die Zahl der ersten Arbeitsschritte ist im Mittel also nur $k_1 = (2N - 1)/2 \approx 2N/2 = N$.
- OK. Nach $k_1 = (2N - 1)/2$ Arbeitsschritten im 1. Durchgang haben wir dann noch $2N - 2$ Socken übrig.
- Wir nehmen wieder einen Socken und vergleichen ihn mit allen anderen. In diesem 2. Durchgang müssen wir ihn im schlechtesten Fall mit $k_2^{\max} = 2N - 3 = 17$ anderen vergleichen, d. h. es fallen im Mittel $k_2 = (2N - 3)/2$ Arbeitsschritte an.
- Das Bildungsgesetz ist klar:
- Im i -ten Durchgang sind $k_i = (2N - (i + 1))/2$ Arbeitsschritte nötig.
 - In jedem Durchgang werden 2 Socken entfernt, insgesamt brauchen wir also N Durchgänge.
- Die Gesamtzahl der Arbeitsschritte $K(N)$ ist damit

$$K(N) = \sum_{i=1}^N k_i = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N 2N - i - 1$$

Kann man die Summe vereinfachen? Man kann! Für $N = 10$ oder $= 100$, haben wir z.B.

$$K(10) = \frac{1}{2}\{(20 - 2) + (20 - 3) + \dots + (20 - 11)\} = \frac{1}{2}\{18 + 17 + \dots + 9\} = 67,5$$

$$K(100) = \frac{1}{2}\{(200 - 2) + \dots + (200 - 101)\} = \frac{1}{2}\{198 + 197 + \dots + 99\} = ?$$

- Nach kurzem Nachdenken kommt man darauf, dass die gesuchte Summe recht ähnlich ist zu dem Problem, das der junge Gauss mit Bravour gelöst hat [1](#). Die kleinste Zahl in der Summe ist $2N - N - 1$, die größte ist $2N - 2$. Addiert man sie, erhält man $3N - 3$. Genau das erhält man auch, wenn man die Zweitkleinste mit der Zweitgrößten addiert und so weiter. Alles in allem hat man $N/2$ -mal diese Summe. Damit erhalten wir eine einfache Formel:

$$K(N) = \frac{N}{2} \cdot \frac{3N - 3}{2} = \frac{3N^2 - 3N}{4}$$

- Vergleichen wir nun den Aufwand, $a \cdot N$ Socken auf einmal zu sortieren, mit dem Aufwand, a -mal portionsweise jeweils N Socken zu sortieren [das ist natürlich einfach $a \cdot K(N)$], dann erhalten wir für das Aufwandsverhältnis $A = K(a \cdot N) / [a \cdot K(N)]$:

$$A = \frac{K(aN)}{a \cdot K(N)} = \frac{3a^2N^2 - 3aN}{3aN^2 - 3aN} = \frac{aN - 1}{N - 1} \approx a$$

- Dabei unterstellen wir, daß $N \gg 1$, so daß die quadratischen Terme den Bruch dominieren.

Damit haben wir eine wesentliche haushaltstechnische Erkenntnis gewonnen: **100** Paar Socken zu sortieren dauert etwa **10**-mal länger, als **10**-mal **10** Paar durchzugehen!

- Und für den Aufwand bei Anwachsen der von Unordnung betroffenen Menge von Elementen (hier: Socken) erhält man $K(aN) / K(N) = a \cdot A \approx a^2$, d. h. Ordnung wieder herzustellen wird quadratisch schwieriger, je länger man die Unordnung wachsen läßt.

- 1) Als Gauß noch in der Grundschule war, wollte sein Lehrer sich eine Ruhepause verschaffen. Er gab seinen Schülern die Aufgabe die Zahlen von 1-100 zu addieren ($1+2+3+ \dots +100 = ?$). Aus der Verschnaufpause wurde nichts, denn prompt meldete sich der junge Gauß mit der richtigen Antwort: 5050! Misstrauisch fragte nun der Lehrer wie er dies so schnell herausgefunden haben wolle.

Na ganz einfach! Gauß erkannte, dass $1+100=101$, $2+99=101$, $3+98=101$ usw ist. Die Summe der ersten und letzten Zahl ergibt immer 101. Es gibt 50 solcher Zahlenpaare, und somit ist die Summe aller Zahlen 50-mal $101 = 5050$.

(Aus dem Internet)


Den Hinweis auf Gauss in diesem Zusammenhang verdanke ich Herrn Raymund Roth.

Lösungen zur Übung 5.3-2

Als Lösung nehmen wir einfach die [Lösung](#) zu einer sehr ähnlichen [Aufgabe](#) aus dem "Defects" Hyperscript

Illustration

Lösungen zur Übung 5-4

 You don't need solutions from me. you did it yourself (I hope).

Illustration

Simulationen der Exponentialfunktionen

Hier kann man die Funktion

$$c_v = c_0 \cdot \exp - \frac{H^F}{kT}$$


in zwei Darstellungen quantitativ generieren (mit einem Java Modul):



- 1. direkt als **$c_v(T)$**
- 2. in [Arrhenius-Darstellung](#), d.h. **$\log(c_v)$** als Funktion von **$1/T$**
- Jeder Teil jeder Kurve kann "vergrößert" dargestellt werden, indem man einfach über den gewünschten Bereich ein Rechteck zieht.
- Bei jeder neuen Berechnung bleibt die zuvor berechnete Kurve in **rot** noch stehen. Die aktuelle Kurve ist immer **blau**







Illustration








Gottseidank?



Advanced




-  Gottseidank? Welchem **Gott** danken wir für das (noch) vorhandene Nichtgleichgewicht im Universum im allgemeinen und auf der Erde im besonderen?


 -  Müssen wir überhaupt einem Gott (oder einer Göttin) danken? Wir kommen hier schneller in ein Grenzgebiet zwischen Naturwissenschaft und Religion, als man vermuten würde.
-  In der "harten" Wissenschaft sind zum Thema "Universum" zur Zeit folgende Punkte allgemein akzeptiert:

 -  Das (für uns sichtbare) **Universum** hat einen **Anfang**. Es entstand praktisch punktförmig im "**Big Bang**" vor ca. **15 Milliarden** Jahren; seitdem dehnt es sich aus.
 -  Und zwar dehnt sich nicht die Materie in einem schon vorhandenen Raum aus, sondern der **Raum als solcher**. (Wie man sich das vorstellen soll weiß nur Einstein seelig et al.). Vielleicht wird das Universum sich irgendwann wieder zusammenziehen, vielleicht auch nicht. Die letztere Version gilt derzeit als wahrscheinlicher, aber das letzte Wort zu diesem Thema ist noch nicht gesprochen.
 -  Das Universum entstand mit **wenig** Entropie, es war zunächst recht ordentlich. Im Laufe der Zeit wird es unordentlicher. Der "Lauf" der Zeit ist überhaupt nur durch den **2. Hauptsatz** definiert, durch den Weg von der Ordnung zur Unordnung.
 -  Die wesentlichen Konstanten des Universums, wie z.B. die **Dimensionalität** (d.h. die **4 Dimensionen** des Raum-Zeit Kontinuums), die **Gravitationskonstante**, die **Lichtgeschwindigkeit**, die **Eigenschaften der Elementarteilchen**, usw., sind alle so, daß im Laufe von einigen Milliarden Jahren komplexe biologische Systeme entstehen konnten. Selbst kleine Änderungen in den Zahlenwerten der universellen Konstanten hätten die Evolution von Lebewesen unmöglich gemacht.
 -  Außerdem verstecken sich im Universum noch bisher unbekannte Elementarteilchen in Form der "**schwarzen Materie**" und darüber hinaus noch die völlig unklare "**dunkle Energie**". Anders ausgedrückt: Im Universum ist der Teufel los!
-  Akzeptiert man diese Prämissen, hat man die Wahl zwischen **4 extremen Ansichten** (und natürlich, gegeben eine gewisse Irrationalität des menschlichen Denkens, ihrer Kombinationen).

 -  **1.** Ein wie auch immer gearteter **Schöpfer** hat das Universum gezielt mit den gewünschten Eigenschaften "**designed**".
 -  **2.** Universen entstehen laufend mit allen möglichen Eigenschaften aus dem Nichts. Wir leben in einem von ∞ vielen **Universen** (alle zusammen heißen "**Multiversum**"), in dem **zufällig** alles "stimmt". Ein ziemlich verschwenderischer Umgang mit Universen.
 -  **3.** Es gibt noch nicht gefundene oder verstandene Prinzipien, die die Existenz von Universen mit anderen Eigenschaften als des unseren logisch unmöglich machen. Das heißt, die Zahlenwerte der wichtigen Konstanten folgen aus den Prinzipien der (noch nicht existierenden) **TOE**, der "**Theory of Everything**". Insbesondere viele theoretische Physiker hoffen, in der **11-dimensionalen "M-Theory"** (früher "**String-Theorie**") genannt, den Ansatz einer **TOE** gefunden zu haben. Aber es gibt auch andere Kandidaten - z.B. die Hypothese, dass auch der Raum und die Zeit gequantelt sind.
 -  **4.** Es ist alles irgendwie ganz anders.
-  Das Nette an diesen **4 Hypothesen** ist, daß sie zur Zeit allesamt weder beweis- noch widerlegbar sind. Jeder darf hier **glauben**.
-  Im angelsächsischen Sprachraum ist es fast Mode geworden, daß mehr oder weniger berühmte Naturwissenschaftler über diese "letzten Fragen" philosophieren und Bücher schreiben. Auch der "**Scientific American**" hat oft Artikel zum Thema. Einige lesenswerte Bücher sind z.B.
-  **Atkins**, Peter W.; **Creation Revisited**.

 -  Atkins versucht, wie fast alle naturwissenschaftliche Autoren, jeden göttlichen Einfluß bei der "Schöpfung" zu verneinen. Er argumentiert, daß auf dem Boden der bekannten **universellen** Naturgesetze, das Universum, so wie wir es kennen, zwangsweise entstehen mußte.
-  **Hawkins**, Stephen; **Eine kleine Geschichte der Zeit**.

 -  Allgemein bekannter Bestseller. Was Hawkins aber eigentlich sagt, ist nicht so ganz klar.
-  **Penrose**, Roger; siehe die Bemerkungen in der R. Penrose gewidmeten Seite.
-  **Barrows**, John .D. und **Tipler**, Frank J.; **The Anthropic Cosmological Universe**.

 -  Die "Bibel" zu dem Thema: Die Naturkonstanten haben **genau** die "richtigen" Werte und wie sich das begründet.

Bildungsenergie - freie Bildungsenthalpie

Advanced

Wie wir gesehen haben, müßte man eigentlich zur Erzeugung einer Leerstelle statt einer *Bildungsenthalpie*, eine *freie Enthalpie der Bildung* betrachten; statt H_V müssen wir G_V schreiben.

- Denn wir betrachten die Bildung von Leerstellen im Gleichgewicht bei *konstantem Druck*; das richtige *thermodynamische Potential* dazu ist die *freie Enthalpie*.
- Bei der Bildung *einer* Leerstelle ändert sich eben nicht nur die *Enthalpie*, sondern auch die *Entropie* des Kristall um S_V , die *Bildungsentropie* einer Leerstelle.
- Die Bildungsentropie berücksichtigt, daß sich der Unordnungsgrad des Kristalls für jede einzelne Leerstelle etwas erhöht, da *lokale* Unordnung entsteht. Das geschieht insbesondere deshalb, weil die Nachbaratome der Leerstelle jetzt *anders* schwingen, andere Schwingungsmoden haben - schließlich fehlt jetzt eine Bindung oder "Feder".
- Diese *Bildungsentropie* hat *nichts* mit der Entropie der Anordnung vieler Leerstellen zu tun, der *Mischungsentropie*. Es ist eine direkt mit der Bildung *einer* Leerstelle verknüpfte Entropie.

Damit kann man leicht sehen, wie die Leerstellenkonzentrationsformel aussehen muß, wenn man eine freie Bildungsenthalpie $G_V = H_V - TS_V$ einführt.

- Wir erhalten für die Konzentration c_V der Leerstellen

$$G_V = \exp \left(- \frac{H_V - TS_V}{kT} \right) = \exp \left(- \frac{S_V}{k} \right) \cdot \exp \left(- \frac{H_V}{kT} \right)$$

- Das ist die *alte Formel* abgesehen von dem Vorfaktor $\exp(S_V/k)$.

Wie groß ist S_V so ungefähr?

- Durch Kombinatorik, durch Abzählen der Möglichkeiten kommt man jetzt nicht mehr weiter. Die statistische Thermodynamik gibt jedoch noch weitere Formeln zur Berechnung von Entropien; damit lassen sich Bildungsentropien von Leerstellen (und natürlich auch von Zwischengitteratomen und Fremdatomen) relativ einfach berechnen.
 - Für eine "normale" Leerstelle, die in etwa so aussieht wie man sie gewöhnlich zeichnet (d.h. nur die Atome in der unmittelbaren Nachbarschaft sind etwas aus ihren Positionen ausgelenkt), gilt $S_V \approx 1k$
 - Der Vorfaktor hat damit die Größenordnung 1; der Einfluß der Bildungsentropie auf die Gleichgewichtskonzentration der Leerstellen ist für prinzipielle Betrachtungen in der Tat vernachlässigbar.
- Dies gilt aber nicht immer und unter allen Umständen. Gerade im für uns *wichtigen Kristall Si* ist die Bildungsentropie von Leerstelle und Eigenzwischgitteratom ungewöhnlich hoch (sie ist mit Hilfe der *Arrheniusgeraden* leicht meßbar, da sie gerade dem Schnittpunkt mit der *lg c* Achse entspricht).
- Dies ist ein deutlicher Hinweis darauf, daß intrinsische Fehlstellen in *Si* relativ ausgedehnt sind, d.h. viele Atome in der Nachbarschaft beeinflussen.

Energie oder freie Enthalpie?

Advanced







- "Gleichgewichtsplatz im Gitter" - müssten wir nicht eigentlich über die freie Enthalpie des System Kristalls - *eine* Leerstelle reden, das für diese Anordnung ein Minimum hat?

 - Wir müssten - eigentlich! Auch eine Kristalle mit nur einer Leerstelle ist ein bisschen unordentlicher als ganz ohne. Allerdings ist der Entropieunterschied zwischen einem Kristall ohne Leerstelle und einem Kristall mit *einer* Leerstelle so klein, dass wir den Entropieteil praktisch vergessen können.
 - Damit haben wir $G = H - TS \approx H \approx U = E$ und alles ist in Butter.
- Wer es genauer wissen möchte, betätigt den Link um alles über die "[Bildungsentropie](#)" *einer* Leerstelle zu erfahren

 - Wer es nicht so genau wissen möchte, merkt sich nur: Richtig große Entropien erhält man durch die [Mischungsentropie](#), durch die die unordentliche Anordnung *vieler* Teilchen.
 - Was ein *einzelnes* Teilchen an Entropie so mit sich herumschleppt, kann man bei Prinzipbetrachtungen in aller Regel vergessen. Es gilt dann wieder das gute alte [Energiminimierungsprinzip](#).

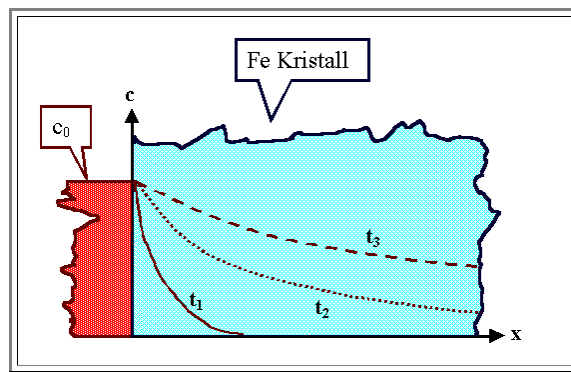
Adolf Fick

Advanced

-  Die Fickschen Diffusionsgesetze kennt jeder - das war es dann aber auch schon. Adolf Fick ist anderweitig in der Physik völlig unbekannt.
-  Das ist auch kein Wunder, denn er war ein Mediziner (Physiologe) – kein Physiker.
-  Als Angestellter der Uni Zürich veröffentlichte der junge Fick **1855** in "Poggendorf's Annalen der Physik" (die **Nr. 1** Zeitschrift damals) eine Arbeit mit dem Titel: "*Über Diffusion*".
-  Der Grund dafür war, daß "*die Diffusion von Wasser durch Membranen nicht nur ein wesentlicher Faktoren des Lebens ist, sondern auch einen extrem interessanten physikalischen Prozeß darstellt, der viel mehr Beachtung durch Physiker erfahren sollte als es bisher der Fall ist*" – wie wahr!
(kein Originalzitat sondern Rückübersetzung aus der englischen Übersetzung)
-  Fick war zwar ein Physiologe, aber sein Ansatz war theoretisch-phänomenologisch. Heute würden wir es eine "linear response"-Theorie nennen.
-  Erst **50** Jahre später hat der (junge) Albert Einstein die Fickschen Diffusionsgesetze aus der Betrachtung der Brownschen Bewegung, der thermisch induzierten Zufallswanderung von Molekülen/Atomen/Teilchen, abgeleitet und damit auf ein solides Fundament gestellt.

Messung von Diffusionsparametern

Im Grundexperiment machen wir genau das, was in der [Figur](#) im Modul 6.2.2 dargestellt ist:



Advanced

- Wir nehmen eine "eindimensionale" (= lange) Probe aus Material **A** (blau), packen Material **B** (rot) auf die Oberfläche, und halten das Ganze bei der Temperatur T_1 für eine Zeit t_1 .
- Danach messen wir das erhaltene Diffusionsprofil, extrahieren den Diffusionskoeffizienten $D(T_1)$ für die Temperatur T_1 , und wiederholen das Experiment mit einer 2. Probe, die natürlich der 1. so ähnlich wie möglich sein sollte, bei einer Temperatur T_2 und erhalten $D(T_2)$. Dann wiederholen wir das Experiment....

Die Fragen dazu sind klar:

- Wie bringt man **B** auf **A**? Beim einfach "nur so" draufpacken haben wir ja nicht **B** auf **A**, sondern **B** + dreckige Oberflächen(oxid)schicht auf dreckiger Oberflächen(oxid)schicht + **A**.
- Wie mißt man Diffusionsprofile? Auch dann noch, wenn **B** nur ein paar nm tief in **A** eingedrungen ist.
- Wie mißt man [Selbstdiffusion](#), d.h. **A** in **A**?

Zur Beantwortung der Fragen schauen wir in einen [Modul](#) des "Iron, Steel and Swords" Hyperscripts.

Zeitmittel = Scharmittel

Advanced

- Wir nehmen es als ziemlich selbstverständlich, daß wir **dieselben** statistischen Angaben über ein System vieler Teilchen auf **zwei** Weisen bekommen können.
 - Betrachten wir als Beispiel einen der Mückenschwärme, die man im Sommer als eine Art Wolke in der Luft hängen sieht (dies ist ein Beispiel, das uns später noch ausführlich beschäftigen wird).
 - Uns interessiert die **mittlere** (skalare) Geschwindigkeit der einzelnen Mücken, die ja wie irr innerhalb des Schwarms herumfliegen.
- Wir können diese mittlere Geschwindigkeit auf **zwei** Weisen messen:
 1. Wir folgen **einer** wahllos herausgegriffenen Mücke für **einige Zeit**, messen ihre Geschwindigkeit zu **verschiedenen** Zeitpunkten und bilden daraus den Mittelwert - das **Zeitmittel** der gewünschten Größe.
 2. Wir messen die Geschwindigkeit **hinreichend vieler** Mücken an **einem** Zeitpunkt und mitteln über die Einzelgeschwindigkeiten - wir bilden das **Scharmittel** der gewünschten Größe.
- Falls die Mücken sich in ihrem statistischen Verhalten nicht unterscheiden, müssen beide Mittelungsverfahren denselben Wert ergeben.
- Nehmen wir Würfel statt Mücken, werden wir mit **einem** Würfel nach **vielen** Würfeln den Mittelwert $(1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6)/6 = 3,5$ bekommen, und wir werden diesen Wert auch finden falls wir mit **vielen** Würfeln **einen** Wurf machen.
- Nun betrachten wir ein System von **N** klassischen Teilchen - Atome, Molekülen, Kügelchen. Jedes dieser Teilchen hat zum Zeitpunkt **t** einen wohldefinierten Ort **r** und einen Impuls **p** (beides Vektoren).
 - Wir definieren einen **6N**-dimensionalen Raum, aufgespannt von den **3N** Koordinatenkomponenten und den **3N** Impulskomponenten.
 - Der komplette Zustand unseres **N**-Teilchensystems zum Zeitpunkt **t** ist in diesem **Phasenraum** durch **einen einzigen** Punkt beschrieben.
- Was macht das System zum Zeitpunkt **t + Δt**?
 - Es ist immer noch durch **einen einzigen** Punkt beschrieben - nur ist der Punkt jetzt woanders im Phasenraum. Nach sehr kurzen **Δt** kann er aber nicht "sehr weit weg" sein vom alten Zustandspunkt.
 - Verfolgen wir den Zustandspunkt für einige Zeit, läuft er auf irgendeiner Bahn, einer **Trajektorie**, durch den Phasenraum. Wir können für diese Bahn statistische Größen definieren, z.B. das Zeitmittel des mittleren Impulses, der Geschwindigkeit, der gesamten Energie, oder auch hochdimensionaler Größen. (Mathematiker haben kein Problem Geschwindigkeiten in höherdimensionalen Räumen zu postulieren).
 - Wird dieses Zeitmittel für reale physikalische Systeme denselben Wert ergeben wie das Scharmittel? Was ist das Scharmittel in diesem Fall?
- Das Scharmittel erhalten wir offenbar falls wir die Zustandspunkte **vieler** vergleichbarer **N**-Teilchensysteme in einen Phasenraum eintragen - wir erhalten eine Verteilung von **N** Punkten, die alle auf ihren jeweiligen Trajektorien durch die (**6N**-dimensionale) Gegend laufen.
- Ist Zeit- und Scharmittel eines physikalischen Systems im Phasenraum identisch? Immer? Oder nur unter spezifischen Voraussetzungen?
 - Die Antwort ist nicht ganz einfach, aber ein zentrales Lemma der statistischen Physik: Es gilt die **Ergodenhypothese**: Zeit- und Scharmittel sind für **ergodische Systeme** identisch!
- In dieser Form ist die **Ergodenhypothese** natürlich eine Tautologie - wir müssen jetzt definieren was ergodische und nicht-ergodische Systeme unterscheidet. Die Fußnote [1\)](#) gibt dazu ein weiteres Beispiel.
 - Das ist nicht einfach - nicht umsonst heißt es Ergoden**hypothese**!
 - Für unsere Zwecke reicht es aber zu wissen, daß alle "normalen" physikalischen System mit einer statistischen Komponente ergodische Systeme sind: **Gase** mit statistisch herumfliegenden Teilchen, **Kristalle** mit statistisch vibrierenden Atomen, **Leerstellen** in Kristallen, die statistisch (d.h. mit "random walk") durch den Kristall diffundieren.
- Wir haben hier ein Beispiel eines "großen" Gedankens - die "Erfindung" des Phasenraum gekoppelt mit einem nichttrivialen Problem der statistischen Betrachtung.
 - Und wer **6N**-dimensionale Räume für nutzlos, weil zu theoretisch-abstrakt hält, wird sich noch wundern: Sie spielen eine zentrale Rolle nicht nur in der gesamten statistischen Physik, sondern insbesondere auch in der nichtlinearen Dynamik, also bei allem was auch nur entfernt mit Chaos, Synergie, Regelung, usw. zu tun hat.

1) Ist eine Gesellschaft, z.B. die Deutsche oder Amerikanische, bezüglich der momentanen Einkommen ein ergodisches System? In anderen Worten: Erhält man, wenn man das (inflationsbereinigte etc.) Einkommen eines beliebigen Individuums über sehr lange Zeiten verfolgt denselben Mittelwert, wie wenn man das mittlere Einkommen aller Individuen zu einem Zeitpunkt berechnet? Wird jeder (oder halt seine Nachkommen) früher oder später sowohl mal Millionär als auch

bitterarm?

Die Unterschiede der Gesellschaftssysteme lassen sich auch daran festmachen. Die Amerikaner sehen sich eher als ergodisches System, die (derzeit über **Hartz 4** wehklagenden Deutschen) eher nicht.

Everybody believes in the exponential law of errors; the experimenters, because they think it can be proved by mathematics; and the mathematicians, because they believe it has been established by observation,

Lippman

in a letter to **Poincaré**

Random Walk, Gauß Verteilung und die Einstein - Smoluchowski Beziehung

In diesem Modul sollen wesentliche statistische Funktionen unmittelbar vom Würfeln abgeleitet werden. Überraschenderweise - auch für mich - ist das weitaus aufwendiger und fehleranfälliger als zunächst gedacht.

- Das Ziel *war* lange Zeit noch nicht ganz erreicht - irgendwo steckt noch ein Fehler der Größe "Wurzel 2". Meine frühere Aufforderung an die Leser, aufzupassen und richtige Lösungen einzuschicken, hat nach vielen Jahren Früchte getragen. Herr **Dr. Felix Scheliga** aus Hamburg hat den Fehler gefunden. Dazu mehr im Text.
- Da hier auf alle Details und Fallstricke ausführlich eingegangen wird, wurde der Modul ziemlich lang und unübersichtlich. Eine Kurzfassung ohne genaue Ableitung der kombinatorischen Formeln usw. findet sich in einem [zweiten Modul](#).
- Aus Gründen der Schreibökonomie und besseren Lesbarkeit wird in diesem Modul auf die *Kursivschreibweise* der Variablen verzichtet.

Die absolute Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Zahl zu würfeln

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit $W_N(x)$, mit N Würfeln, die alle *binär* sind, d. h. nur Zahl oder Wappen, rot oder grün, oder wie wir es hier verwenden, die Zahl **+1** oder **-1** als Augenzahl haben können. Nach einem Wurf addieren wir (vorzeichenrichtig) und bekommen als Ergebnis eine Zahl x die zwischen $-N$ und $+N$ liegen muss. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit ist

$$W_N(x) = \frac{\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}}{\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}} = \frac{P_x}{P_N}$$

Wie groß ist P_x und P_N ?

- P_N , die Anzahl *aller* Möglichkeiten des Ausgangs des Würfeln, ist leicht zu konstruieren:
Mit $N = 1$ gibt es 2 Möglichkeiten (**+1** und **-1**); $P_N = 2$
Mit $N = 2$ gibt es 4 Möglichkeiten (**+1/+1** und **+1/-1** und **-1/+1** und **-1/-1**); $P_N = 4$
Mit $N = 3$ gibt es 8 Möglichkeiten (**+1/+1/+1** und **+1/+1/-1** und); $P_N = 8$.
- Eine Tabelle der Möglichkeiten zeigt dies graphisch; die gelben Spalten in den einzelnen Tabellen zeigen die möglich Ergebnisse x

N = Zahl der Würfel	Mögliche Würfe und Summe (gelb)	P _N = Zahl der möglichen Würfe																				
1	<table><tr><td>+1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr></table>	+1	+1	-1	-1	2																
+1	+1	-1	-1																			
2	<table><tr><td>+1/+1</td><td>+2</td><td>-1/+1</td><td>0</td></tr><tr><td>+1/-1</td><td>0</td><td>-1/-1</td><td>-2</td></tr></table>	+1/+1	+2	-1/+1	0	+1/-1	0	-1/-1	-2	4												
+1/+1	+2	-1/+1	0																			
+1/-1	0	-1/-1	-2																			
3	<table><tr><td>+1/+1/+1</td><td>+3</td><td>-1/+1/+1</td><td>+1</td></tr><tr><td>+1/+1/-1</td><td>+1</td><td>-1/+1/-1</td><td>-1</td></tr><tr><td>+1/-1/+1</td><td>+1</td><td>-1/-1/+1</td><td>-1</td></tr><tr><td>+1/-1/-1</td><td>-1</td><td>-1/-1/-1</td><td>-3</td></tr></table>	+1/+1/+1	+3	-1/+1/+1	+1	+1/+1/-1	+1	-1/+1/-1	-1	+1/-1/+1	+1	-1/-1/+1	-1	+1/-1/-1	-1	-1/-1/-1	-3	8				
+1/+1/+1	+3	-1/+1/+1	+1																			
+1/+1/-1	+1	-1/+1/-1	-1																			
+1/-1/+1	+1	-1/-1/+1	-1																			
+1/-1/-1	-1	-1/-1/-1	-3																			
4	<table><tr><td>+1/+1/+1/+1</td><td>+4</td><td>-1/+1/+1/+1</td><td>+2</td></tr><tr><td>+1/+1/+1/-1</td><td>+2</td><td>-1/+1/+1/-1</td><td>0</td></tr><tr><td>...</td><td>...</td><td>...</td><td>...</td></tr><tr><td>+1/-1/-1/+1</td><td>0</td><td>-1/-1/-1/+1</td><td>-2</td></tr><tr><td>+1/-1/-1/-1</td><td>-2</td><td>-1/-1/-1/-1</td><td>-4</td></tr></table>	+1/+1/+1/+1	+4	-1/+1/+1/+1	+2	+1/+1/+1/-1	+2	-1/+1/+1/-1	0	+1/-1/-1/+1	0	-1/-1/-1/+1	-2	+1/-1/-1/-1	-2	-1/-1/-1/-1	-4	16
+1/+1/+1/+1	+4	-1/+1/+1/+1	+2																			
+1/+1/+1/-1	+2	-1/+1/+1/-1	0																			
...																			
+1/-1/-1/+1	0	-1/-1/-1/+1	-2																			
+1/-1/-1/-1	-2	-1/-1/-1/-1	-4																			

Das Bildungsgesetz ist klar:

$$P_N = 2^N$$

Dabei haben wir aber unausgesprochen eine *sehr wichtige* Annahme gemacht: .

Die Würfel sind unterscheidbar!

In den obigen Tabellen ist die *erste* Zahl immer der 1. Würfel, die 2. Zahl immer der 2. Würfel usw., d.h. die Würfel tragen fiktive Nummern oder Farben als Unterscheidungsmerkmal. In anderen Worten: wir können für ein- und-dasselbe Ergebnis unterscheiden auf wie viel verschiedene Arten wir es bekommen können. Falls wir "Würfel" mit mehr als 2 "Augen" betrachten, bekommen wir, leicht einzusehen, für den allgemeinen Fall eines Würfels mit **A** Augen die nachfolgende Formel. Wer's nicht leicht einsieht betätigt [diesen Link](#).

$$P_N = A^N$$

Es bleibt, **P_x** (= Zahl der Möglichkeiten **x** zu würfeln) zu bestimmen. Auch das lässt sich durch nachdenken und probieren ermitteln; allerdings müssen wir mehr Aufwand treiben und *sehr sorgfältig* überlegen, was genau ermittelt werden soll.

Betrachten wir dazu ein Beispiel. Wir haben **10** unterscheidbare *digitale* Würfel (**N = 10**), und fragen nach der *Zahl der Möglichkeiten*, für die *Summe x* eine **+2**, eine **+3** oder eine **-8** zu würfeln.

Wie auch immer die Würfel fallen, es werden **N⁺** Würfel die **+1** zeigen und **N⁻** Würfel die **-1**. Für unser Beispiel gelten die Gleichungen

Summe x = +2

$$N^+ + N^- = 10$$

$$N^+ - N^- = 2$$

oder

$$2 + N^- + N^- = 10$$

$$N^- = 4$$

$$N^+ = 6$$

Summe x = +3

$$N^+ + N^- = 10$$

$$N^+ - N^- = 3$$

oder

$$3 + N^- + N^- = 10$$

$$N^- = 7/3$$

????

Summe x = -8

$$N^+ + N^- = 10$$

$$N^+ - N^- = -8$$

oder

$$N^- - 8 + N^- = 10$$

$$N^- = 9$$

$$N^+ = 1$$

Erste wichtige Erkenntnis: Es gibt *keine* Möglichkeit, eine **3** oder verallgemeinert, eine *ungerade* ganze Zahl zu würfeln, da die allgemeine Gleichung $N^- = (10 - x)/2$ für ungerade x keine ganzzahligen Werte für N hergibt.

- Man kann das auch anders ausdrücken, indem man die gesamte Augenzahl x über die Zahl der N^+ oder N^- Würfe koppelt, es gilt

$$x = N^+ - (N - N^+) = 2N^+ - N$$

$$N^+ = \frac{1}{2} \cdot (x + N)$$

- Dabei sind aber immer nur *ganzzahlige* Werte für die N und x zugelassen!

Wir können P_x damit auch über P_{N^+} , die Zahl der Möglichkeiten N^+ mal eine **+1** zu würfeln, berechnen. Das ist einfacher. P_x würden wir dann erhalten, indem wir in der abzuleitenden Formel N^+ durch $\frac{1}{2} \cdot (x + N)$ ersetzen.

Dabei haben wir aber ein mögliches Problem - hier liegt ein erster großer Fallstrick der Kombinatorik. Denn bei **geradzahligem** Würfelanzahl N können wir nur **geradzahlige** Augenzahlen x erzielen, und bei **ungeradzahligem** Würfelanzahl N werden wir **ungerade** x haben.

- Da wir aber eine Formel suchen, die für *alle* N gilt, wir aber für jedes gegebene N immer nur *die Hälfte* der insgesamt vorhandenen Möglichkeiten sehen, müssen wir bei der Berechnung von P_x später etwas vorsichtig sein.

Aber nun zu P_x oder P_{N^+} . Natürlich ist die Formel *dazu bekannt*, wir wollen sie hier aber ausführlich ableiten. Um Bildungsgesetze in der Kombinatorik zu erkennen oder zu überprüfen, empfiehlt es sich zunächst immer, eine Tabelle zu machen. Bleiben wir also bei $N = 10$ Würfeln und betrachten die erzielbaren Ergebnisse für die **10** Möglichkeiten für N^+ . Dabei bedenken wir, daß die Würfel *unterscheidbar* sind. Man kann das so ausdrücken:

- Würfeln wir mit **10** roten, grünen, blauen, Würfel, sind auch die *Kombinationen*

-1, +1, +1,

+1, -1, +1,

usw. alle unterscheidbar - obwohl das Ergebnis immer **+9** ist.

- Hier versteckt sich schon die nächst wichtige Lehre: Wir müssen nicht nur aufpassen, ob die *Würfel* unterscheidbar oder ununterscheidbar sind, sondern diese Frage auch auf *Kombinationen* anwenden. Selbst wenn die obigen Würfel alle rot und damit ununterscheidbar wären, könnten wir dennoch evtl. die *Kombinationen* noch unterscheiden. Wir werden das gleich näher kennenlernen.

Jetzt noch schnell ein weiterer Punkt. Falls wir mit *einem* Würfel **10** mal würfeln, statt mit **10** Würfeln **1** mal, erwarten wir - statistisch - dasselbe Ergebnis. Das ist die "*Zeitmittel = Scharmittel*" *Hypothese*, die uns schon früher begegnet ist. Das scheint zwar selbstverständlich zu sein, aber bei genauem Hinsehen kann es hier durchaus Probleme geben.

- Falls wir mit *einem* Würfel **3** mal hintereinander würfeln würden, drückt sich die jetzt sinnlose Unterscheidbarkeit des Würfels in der *Unterscheidbarkeit des Wegs* zum Ziel aus: Die Sequenz **+1, +1, -1** ist ein *anderer* Weg zum Endpunkt **+2** als die Sequenz **-1, +1, +1**.

Hier ist die entsprechende Tabelle

N ⁺	N ⁻	Σ	Zahl Möglichkeiten	Kommentar	Formel P _{N⁺} =																																																												
0	10	-10	<div>1</div> <div><table><tr><td colspan="10">Würfelnummer</td></tr><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>7</td><td>8</td><td>9</td><td>10</td></tr><tr><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr></table></div>	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		?																														
Würfelnummer																																																																	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																								
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																								
1	9	-8	<div>10</div> <div><table><tr><td colspan="10">Würfelnummer</td></tr><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>7</td><td>8</td><td>9</td><td>10</td></tr><tr><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td>-1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td colspan="10">10 Zeilen.....</td></tr><tr><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>+1</td></tr></table></div>	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	10 Zeilen.....										-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	<p>Nicht nur die <i>Würfel</i>, auch alle ihre <i>Anordnungen</i> sind <i>unterscheidbar</i>.</p> <p>Dies bedeutet: Wenn man einen bestimmten Würfel auf +1 setzt und dann die Möglichkeiten für die anderen Würfel "durchdekliniert", wird keine der auftretenden Kombinationen identisch sein mit den Kombinationen, die man erhält wenn man diese "Deklinationsübungen" mit einem anderen auf +1 gesetzten Würfel durchführt.</p>	N (?)
Würfelnummer																																																																	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																								
+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																								
-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																								
10 Zeilen.....																																																																	
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																																								

2	8	-6	<div>45</div> <div>Wir bräuchten jetzt eine dreidimensionale Tabelle - ersatzweise machen wir mehrere Tabellen</div> <div>1. Tabelle: 1. Würfel immer +1</div> <table><tr><th colspan="10">Würfelnummer</th></tr><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>7</td><td>8</td><td>9</td><td>10</td></tr><tr><td>+1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td>+1</td><td>-1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td colspan="10">9 Zeilen.....</td></tr><tr><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>+1</td></tr></table> <div>2. Tabelle: 2. Würfel immer +1</div> <table><tr><th colspan="10">Würfelnummer</th></tr><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>7</td><td>8</td><td>9</td><td>10</td></tr><tr><td>+1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td>-1</td><td>+1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr><tr><td colspan="10">9 Zeilen.....</td></tr><tr><td>-1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>-1</td><td>+1</td></tr></table> <div>3. Tabelle: 3. Würfel +1; 9 Möglichkeiten für den Rest.</div> <div>.....</div> <div>Und so weiter - Insgesamt 10 Tabellen</div>	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	9 Zeilen.....										+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	9 Zeilen.....										-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	<div>Es gibt 9 Möglichkeiten falls der 1. Würfel +1 zeigt.</div> <div>Es gibt 9 Möglichkeiten falls der 2 Würfel +1 zeigt.</div> <div>usw.; das Ganze N mal.</div> <div>Aber: Es gibt trotz unterscheidbarer Würfel jetzt ununterscheidbare Anordnungen:</div> <div>Ob der m-te Würfel auf +1 gesetzt ist und der k-te Würfel bei der "Durchdekliniation" +1 zeigt ist ununterscheidbar von der Anordnung, in der der k-te Würfel auf +1 gesetzt ist und der m-te Würfel beim "Durchdeklinieren" +1 zeigt.</div> <div>Bei allen Kombinationen gibt es zwei dieser ununterscheidbaren Anordnungen. In den beiden ausgeführten Tabellen sind sie rosa markiert! Nur die Hälfte aller Möglichkeiten darf also berücksichtigt werden - wir müssen durch 2 dividieren. Insgesamt erhalten wir (9 · 10)/2 = 45 Möglichkeiten eine 8 zu würfeln.</div>	<div>(N · (N - 1))/2 (?)</div>
Würfelnummer																																																																																																																													
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																																																																																				
+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
9 Zeilen.....																																																																																																																													
+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																																																																																																				
Würfelnummer																																																																																																																													
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																																																																																				
+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
9 Zeilen.....																																																																																																																													
-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																																																																																																				
3	7	-4	<div>120</div> <div>Siehe nebenstehenden Text</div>	<div>Wir setzen einen 1. Würfel auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für einen weiteren Würfel mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für den letzten Würfel, der +1 zeigen muß.</div> <div>Insgesamt gibt es N(N - 1)(N - 2) Möglichkeiten der "Durchdekliniation"</div> <div>Darunter sind aber jeweils 6 ununterscheidbare Anordnungen. Dies wird klar, wenn wir beispielsweise die Anordnungsmatrix betrachten, bei der die Würfel Nr.1, Nr.4 und Nr.8 die +1 zeigen. Alle diese Anordnungen sind ununterscheidbar!</div> <div>Die Farbcodierung bedeutet:</div> <div>rot = primär "gesetzt"</div> <div>blau = sekundär gesetzt</div> <div>grün = verbleibende Möglichkeit</div> <table><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr><tr><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>+</td><td>-</td><td>-</td><td>-</td></tr></table>	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	-	<div>(N(N - 1)(N - 2))/1 · 2 · 3 (?)</div>																																																		
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
+	-	-	+	-	-	+	-	-	-																																																																																																																				
			Allgemein																																																																																																																										

			...	(Zahl der möglichen "Deklinationen")/(Zahl der ununterscheidbaren Anordnungen) Das Bildungsgesetz ist offenbar
x	10 - x	-10 ... +10		$P_{N+} = \frac{N \cdot (N-1) \cdot (N-2) \cdot \dots \cdot (N-N^++1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot N^+}$

Das ist dieselbe Formel wie bei der [Zahl der Anordnungen von Leerstellen](#). Bevor wir die obige Formel weiterentwickeln, aber noch einige Anmerkungen zu den **Fallstricken der Kombinatorik**.

- Man muß sorgfältig trennen zwischen unterscheidbaren oder *un*unterscheidbaren **Würfeln** (oder Teilchen) und **Anordnungen**. Die *Würfel* in obiger Tabelle sind *unterscheidbar* (durch ihre Nummer bzw. Spalte in der Tabelle), einige ihrer *Anordnungen* in der obigen Systematik aber *nicht*. Man müßte ein *zweites* Merkmal einführen (in der Tabelle ist das die Farbe für die Nummer der "Setzung"), um auch alle Anordnungen unterscheiden zu können.
- Die unterscheidbaren Anordnungen sind oft leichter zu sehen, wenn man nicht mit **N** Würfeln gleichzeitig wirft, sondern mit *einem* Würfel **N** mal - das Ergebnis wird *dasselbe* sein, aber man wird identische Anordnungen nicht doppelt zählen. Dies ist am einfachsten in einer [Graphik](#) darstellbar.

Die Sprache ist manchmal zu begrenzt, um die Feinheiten eindeutig darzustellen oder gibt Anlaß zu Mißverständnissen. Betrachten wir einen [Satz aus obiger](#) Tabelle:

- Wir setzen einen 1. Würfel auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für einen weiteren Würfel mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für den letzten Würfel, der +1 zeigen muß.*
- Man hätte auch schreiben können:
Wir setzen *die* 1. Münze auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für *die* 2. Münze mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für *die* 3. Münze die +1 zeigen muß.
- Oder vielleicht:
Wir setzen *den* 1. Würfel auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für *den* 2. Würfel mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für *den* 3. Würfel, der +1 zeigen muß.
- Das wäre nicht falsch gewesen, aber möglicherweise mißdeutig. Denn mit den Bezeichnungen 1., 2. und 3. Würfel meinen wir in diesem Zusammenhang nicht die Würfel mit den *Nummern* 1, 2 und 3 (das Unterscheidungsmerkmal der Würfel), sondern die *Reihenfolge*, in der wir die Werte "setzen".

Das größte Problem ist vielleicht, daß normale Menschen kein Gefühl für das ungefähre Ergebnis einer kombinatorischen Aufgabe haben. Wieviele fünfstelligen Zahlen kann man mit den Ziffern **0, 3, 5, 9** bilden? Wenn die **0** nicht am Anfang stehen darf? Wenn keine Ziffer mehr als **2** mal vorkommen darf? Wenn jede Ziffer mindestens **1** mal vorkommen muß?

- Wenige Menschen werden bei dieser simplen Aufgabe ein Gefühl für die Größenordnung der Antwort und die Reihenfolge der Lösungen geordnet nach Größe haben - es hilft nichts, man muß rechnen.

Jetzt aber zu unserer Formel für P_{N+} . Wie bei der Berechnung der Leerstellenkonzentration, erweitern wir erst mit $(N - x)!$ um eine bessere Darstellung zu bekommen. Die Ausgangsformel ist

$$P_{N+} = \frac{N(N-1)(N-2) \cdot \dots \cdot (N-N^++1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot N^+} = \frac{N(N-1)(N-2) \cdot \dots \cdot (N-N^++1)}{N^+!}$$

- Multiplizieren mit $(N - N^+)!/(N - N^+)!$ ergibt **N!** im Zähler und $N^+! \cdot (N - N^+)!$ im Nenner, wir erhalten

$$P_{N+} = \frac{N!}{N^+! \cdot (N - N^+)!} = \binom{N}{N^+}$$

Diese Formel hat einen eigenen Namen: Es ist der [Binominalkoeffizient](#) von **N** und **N⁺**; geschrieben in Klammern ohne Bruchstrich wie oben gezeigt.

- Der Binominalkoeffizient ist die Lösung einer Standardaufgabe der [Kombinatorik](#), die in verschiedenster Gestalt immer wieder vorkommt: *Wieviele Möglichkeiten gibt es, aus **N** Elementen **N⁺** auszuwählen, wobei wir zwar die Elemente, nicht aber die Anordnungen unterscheiden.*

In unserer ursprünglichen Fragestellung wollten wir aber nicht **N⁺** ausrechnen, d.h. die Zahl der Möglichkeiten, daß **N⁺** von **N** Würfeln **+1** zeigen (oder nach **N** mal würfeln mit einem Würfel **N⁺** mal die **+1** kam), sondern **P(x)**, die Zahl der Möglichkeiten die Zahl **x** zu würfeln. Wie [weiter oben](#) schon festgehalten, müssen wir dazu **N⁺** durch $1/2 \cdot (x + N)$ substitutionieren. Wir erhalten dann für **P_x**

$$P_x = \frac{N!}{\{1/2 \cdot (x + N)\}! \cdot \{N - [1/2 \cdot (x + N)]\}!}$$

$$= \frac{N!}{\{1/2 \cdot (N + x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

Damit können wir unsere ursprüngliche Fragestellung beantworten. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $W_N(x)$, mit N Würfeln, die alle digital sind, d. h. nur $+1$ oder -1 als Augenzahl haben, mit einem Wurf eine Summe x zwischen $-N$ und $+N$ zu würfeln. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit war

- $W_N(x) = (\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}) / (\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}) = P_x / P_N$. Somit ergibt sich mit den jetzt bekannten Formeln für P_x und $P_N = 2^N$

$$W_N(x) = \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N + x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

Diese Formel ist noch exakt richtig.

- Sie gibt jedoch *nur* sinnvolle Antworten, falls N und x *beide* geradzahlig, *oder beide* ungeradzahlig sind.
- Das ist leicht zu sehen: Setzen wir z.B. $N = 8$ und $x = 3$, bekommen wir im Nenner die Ausdrücke $5,5!$ und $2,5!$ - und das gibt es nicht (zumindest nicht in der Kombinatorik).

In anderen Worten: Unsere obige Formel deckt nur *die Hälfte* aller Möglichkeiten ab, die wir im allgemeinen Fall haben werden. Bei der jetzt erfolgenden Verallgemeinerung müssen wir deshalb schreiben:

$$W_N(x) = 0,5 \cdot \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N + x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

Die genäherte Wahrscheinlichkeitsdichte

Da man mit Fakultäten nicht allzuviel anfangen kann, wird jetzt mit Hilfe der Stirlingsche Formel *mathematisch genähert*. Aus Gründen, die wir später noch genauer diskutieren, verwenden wir hier aber die "bessere" Version der Stirlingschen Formel, nämlich den Ausdruck

- Stirlingsche Formel:

$$\ln N! \approx (N + 1/2) \cdot \ln N - N + \ln (2\pi)^{1/2}$$

Es bleibt noch die reine Rechenaufgabe, aus $W_N(x)$ mit Hilfe der obigen Stirlingschen Formel und evtl. weiteren sinnvoller Näherungen eine passende *analytische* Gleichung zu machen. Da der Umgang mit der Stirlingschen Formel geübt sein will, wollen wir das in einer Übungsaufgabe tun.

- Dabei gibt es noch einige weitere Überraschungen mathematischer Art; es lohnt sich unbedingt hier zu üben oder zumindest die Lösung der Aufgabe anzuschauen.

Übung 6-5

Umgang mit Fakultäten und der Stirlingformel

Als Ergebnis erhalten wir unter der Bedingung $x/N \ll 1$, mit der von **Dr. Felix Scheliga** beigesteuerten richtigen Rechnung, und nur für Fälle weit weg von den maximal (bzw. minimalen) möglichen Würfelergebnissen (im Beispiel ± 10):

$$w_N(x) = \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$$

Das sollte eigentlich die Gaußsche Normalverteilung sein, die sich in der Normalform für den (hier vorliegenden) eindimensionalen Fall allgemein so schreibt

$$w_G(x) = \left(\frac{1}{2\sigma^2 \cdot \pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2\sigma^2}$$

Offenbar ist also $N = 2\sigma^2$ zu setzen.

Die obige Formel oder Gauss Verteilung gibt jetzt auch sinnvolle Antworten auf Fragen, die unsere Ausgangsformel verweigert hätte. Wir erhalten jetzt auch Zahlenwerte falls wir x ungeradzahlig wählen und N geradzahlig (und umgekehrt). Besteht hier ein Zusammenhang?

Ja! Denn wir suchen ja eine Formel, die für alle N gilt, bisher erhalten wir aber für jedes gegebene N immer nur die die Hälfte der insgesamt vorhandenen Möglichkeiten aus der Menge der N . In anderen Worten: Wenn ich nicht weiß, ob N geradzahlig oder ungeradzahlig ist, wird eine Wahrscheinlichkeit z.B eine geradzahlige Zahl x zu würfeln nur halb so hoch sein wie für geradzahlige N errechnet, denn die Wahrscheinlichkeit für ein geradzahliges N ist natürlich $\frac{1}{2}$.

Die Gaussverteilung (wie auch unsere analytische Formel) ist keine absolute Wahrscheinlichkeit mehr, sondern eine Wahrscheinlichkeitsdichte (das wird gleich im Detail erläutert).

Sie gibt uns auch einen Zahlenwert für die Wahrscheinlichkeitsdichte, die Zahl **6,5** oder auch die Zahl π zu würfeln. Sogas gibt es nicht, und damit kann es auch keine absolute Wahrscheinlichkeit dafür geben. Zu absoluten Wahrscheinlichkeiten für die Fälle, die es gegen kann, kommt man, indem man den (Mittel)wert der Gaussverteilung in dem Intervall zwischen den wirklich erreichbaren Werten mit dem Wert des Intervalls multipliziert - und in unserem Fall wäre dieses Intervall = **2**, da wir ja immer nur von geraden zu geraden oder ungeraden zu ungeraden Zahlen "materialisieren" dürfen.

In der Ableitung der Gauss-Verteilung im "Atkins", an der sich dieser Modul ausrichtet, sind im übrigen ebenfalls Fehler zu verzeichnen; das Endergebnis aber ist richtig.

Nach viel Mühen erhalten wir also tatsächlich als Ergebnis die berühmte **Gaußverteilung**, die **Normalverteilung** oder die **Gaußsche Glockenkurve**, benannt nach dem berühmten Mathematiker **Gauß**, eine der wichtigsten Funktionen der Statistik.

Einige Eigenschaften und Besonderheiten

Mit der Herleitung der Gaußschen Glockenkurve für ein Münzwürfspiel haben wir unsere eigentliche Aufgabe noch nicht gelöst. Wir wollten wissen, wie weit im Mittel bei einem "**Random Walk**" ein Teilchen sich nach N Sprüngen von seinem Ausgangspunkt entfernt hat.

Mit der zugehörigen Gaußverteilung kennen wir erstmal die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen bei eindimensionaler Diffusion nach N Schritten x Einheiten vom Ursprung entfernt zu finden.

Dazu verschieben wir einfach unser Teilchen um eine Einheit nach rechts ($+x$) oder links ($-x$) je nachdem ob wir $+1$ oder -1 würfeln. Oder, falls wir mit N Würfeln auf einmal würfeln, verschieben wir es eben um den Wert x der sich ergibt.

Wir müssen nun, um zum Ziel zu kommen, erstmal die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten für die dreidimensionale Diffusion betrachten und daraus dann die entsprechenden Schlüsse ziehen.

Das kann man auf verschiedene Weisen tun. Ein Weg ist sicherlich, die obige Betrachtung auf die normalen Würfel mit **6** Augen auszudehnen, mit einer Konvention für die Zuordnung der Augenzahlen zu den Bewegungen, z.B. $1 = +x$, $2 = -x$, $3 = +y$, usw..

Man kann aber auch **3 Sätze** von digitalen Würfeln (= Münzen) nehmen, z.B. **1-**, **2-** und **5 DM** Münzen (so man sie nach Einführung des Euro noch hat), und eine Münzsorte für die Bewegung in einer Koordinatenachse verwenden. Wiederum ist es egal, ob wir N (unterscheidbare; z.B. numerierte) Münzen jeder Münzsorte gleichzeitig werfen oder sequentiell, d.h. erst für die x -Achse, dann für die y -Achse, schließlich für die z -Achse (in dieser Vorgehensweise genügte auch schon eine Münzsorte, wir müssen aber immer wissen für welche Achse wir werfen).

- Die Vorgehensweise ist deswegen egal, weil die Bewegungen in den drei Achsen **vollständig unabhängig** voneinander sind. Was auf der **y**-Achse geschieht wird in keinsten Weise davon beeinflusst, was auf den beiden anderen Achsen vor sich geht.
- Das hat eine wichtige Konsequenz, die uns die Rechnung sehr erleichtert: Die Einzelwahrscheinlichkeiten für die einzelnen Koordinaten sind **alle identisch**, unabhängig voneinander und gehorchen der bereits abgeleiteten Formel. Die Gesamtwahrscheinlichkeit $w_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$, das Teilchen bei den Koordinaten $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ zu finden, ist damit das **Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten**:
- $w_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = w_N(x) \cdot w_N(y) \cdot w_N(z)$
- Wenn man die Gauss-Verteilung einsetzt (mir Koordinaten oder Ortsvektor \underline{r}) erhält man

$$w_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^{3/2} \cdot \exp - \left(\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2N} \right)$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^{3/2} \cdot \exp - \left(\frac{r^2}{2N} \right)$$

- Das war recht einfach und schmerzlos. Das Ergebnis zeigt Kugelsymmetrie, wie es auch sein muß, d. h. die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo bei $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ zu finden, hängt nur vom Abstand $|\underline{r}| = r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ des Teilchens vom Ursprung ab. Grundsätzlich aber ist \underline{r} ein Vektor; das muß immer berücksichtigt werden (auch wenn wir jetzt den Unterstrich wieder weglassen).
- Haben wir damit unsere Aufgabe gelöst? Wir haben jetzt schließlich eine Formel für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei jeder beliebigen Koordinate $\mathbf{r} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ zu finden.
Aber die Antwort ist trotzdem: **Nein!**
Unserer Formel ist mit **zwei** Besonderheiten behaftet, die wir berücksichtigen müssen!
- 1. Die Gaußschen Glockenkurve ist zunächst eine **Näherungsformel**. Wir haben zwei **Näherungen** gemacht: eine mathematische (**Stirlingsche Formel**) und eine physikalische ($x/N \ll 1$). Über die damit verbundenen Konsequenzen sind wir uns halbwegs klar: Die Gaußsche Glockenkurve ist aber für große **N** schon gut genug, und hier liegt nicht das Problem.
- 2. Die Gaußsche Glockenkurve hat aber eine ganz andere **Qualität**, als die **Ausgangsformel** mit den Fakultäten! Sie ist nicht mehr **diskret** wie die Ausgangsformel, sondern eine **Kontinuumsformel**, d.h. sie ist auch für nicht-ganzzahlige **x** definiert.
- Damit haben wir eine subtile Änderung der **Bedeutung des Begriffs Wahrscheinlichkeit** durchgeführt. Wir haben einen Übergang von einer **absoluten Wahrscheinlichkeit** zu einer **Wahrscheinlichkeitsdichte** gemacht.
- Was das bedeutet, kann man sich auf mehrere Arten verdeutlichen:
- In unserem Beispiel (und in jedem beliebigen anderen Beispiel), ist die **absolute** Wahrscheinlichkeit **W** (zur Unterscheidung jetzt groß geschrieben) nur für **diskrete** Werte von $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ definiert. Um diese Werte aus der kontinuierlichen Formel zu erhalten, müssen wir den Raum in Zellen einteilen mit Zellabstand = Abstand zwischen den diskreten Werten und die Wahrscheinlichkeitsdichte in der gewünschten Zelle aufintegrieren. Wir erhalten $W(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}) = \int w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) dV$ wobei die Integration über die Zelle führt. Ist die Zelle so klein, daß in ihr $w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \approx \text{const.}$ gilt, erhalten wir direkt $W(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}) \approx w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \cdot V$
- Daß man $w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ nicht mit $W(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ verwechseln darf, ergibt sich auch rein logisch aus der Definition einer absoluten Wahrscheinlichkeit. Denn jedes beliebige Volumen enthält ∞ viele Punkte $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$, so daß die **absolute** Wahrscheinlichkeit, eine endliche Zahl von Teilchen oder Vorgängen bei irgendeinem von ∞ vielen Punkten zu finden immer $W(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = 0$ sein muß. $w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ ist aber nicht $= 0$ für beliebige Koordinaten; es kann also **nicht** eine absolute Wahrscheinlichkeit ausdrücken.
- Wir hatten exakt die gleich Situation bereits bei der **Interpretation der Wellenfunktion** $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ kennengelernt. Auch dort war nur $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \cdot dV$, und nicht $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ selbst ein Maß für die **absolute** Wahrscheinlichkeit.
- Das bringt uns auf eine Übungsaufgabe: Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden $= 1$ sein muß, gilt für Wahrscheinlichkeitsdichten immer die Normierungsbedingung

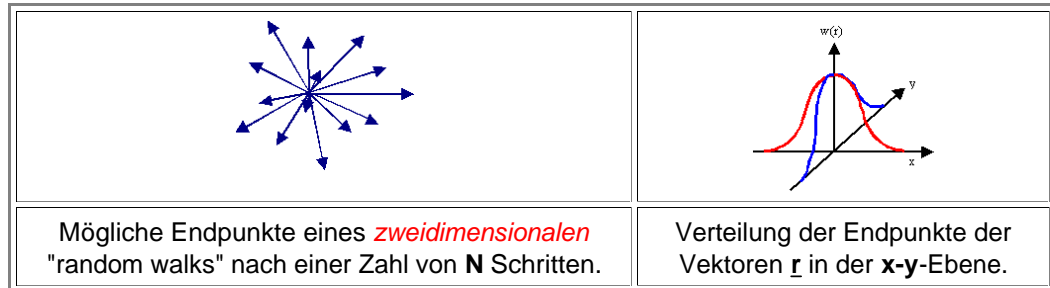
$$\int_{-\infty}^{+\infty} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) dx dy dz = 1$$

- Da wir bei der Herleitung der Glockenkurve keine freien Parameter haben, sollte diese Bedingung eigentlich erfüllt sein (allerdings möglicherweise nur ungefähr, da wir bei der Herleitung der Gaußverteilung genähert haben?) Das läßt sich überprüfen - auf zur Normierung Gaußverteilung, aber bitte mal selbst machen.

Mit der Gaußverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen in einem gegebenen Volumenelement zu finden, kann man nun eine Vielzahl von Fragen stellen und lösen, jeweils noch getrennt nach ein- zwei- und dreidimensionalem "Random Walk". Wir stellen uns einigen der möglichen Fragen und illustrieren was gemeint ist für den **zweidimensionalen** Fall

1. Was ist der **Mittelwert** aller möglichen **Vektoren** \underline{r} vom Startpunkt bis zum Endpunkt nach **N** Sprüngen?

- Die Antwort darauf ist trivial: Da für jeden beliebigen Vektor \underline{r} , der einen Endpunkt charakterisiert, mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch der Vektor $-\underline{r}$ vorkommen wird, gilt für den Mittelwert von \underline{r} - wir schreiben $\langle \underline{r} \rangle$ - immer $\langle \underline{r} \rangle = 0$.

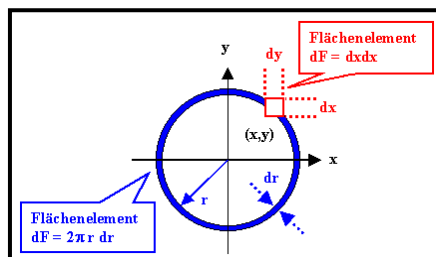


- Diese Frage ist also bei einem echten "random walk" nicht spannend - das Ergebnis ist immer $\langle \underline{r} \rangle = 0$. Man kann das Ganze aber auch "rückwärts" betrachten: Falls wir $\langle \underline{r} \rangle \neq 0$ finden - zum Beispiel als experimenteller Befund - haben wir **keinen** "random walk".

2. Eine viel bessere Frage ist die nach dem **Mittelwert der Beträge** von \underline{r} .

- Das läßt sich am einfachsten machen, indem wir \underline{r} quadrieren und für den Betrag $|\underline{r}| = r = (\underline{r}^2)^{1/2}$ schreiben. Das bedeutet, wir fragen jetzt primär nach dem Mittelwert von $(\underline{r}^2)^{1/2}$.
- Dazu müssen wir die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Wertes $|\underline{r}|$ kennen, oder - wir behandeln den **zweidimensionalen** Fall - die Wahrscheinlichkeit dafür, daß r zwischen $|\underline{r}|$ und $|\underline{r}| + \Delta|\underline{r}|$ liegt.

Wir fragen - **und das ist sehr wichtig** - jetzt nur noch nach der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer bestimmten Länge von \underline{r} , eben $|\underline{r}|$, und nicht mehr danach in welchem (cartesischen) Flächenelement $\Delta \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Delta x \Delta y$ der Vektor \underline{r} endet.

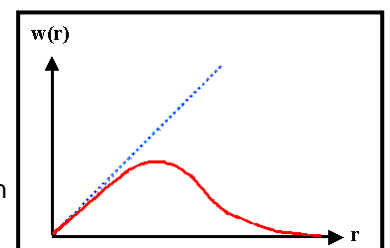


Das Flächenelement $\Delta x \cdot \Delta y$ muß jetzt (im **zweidimensionalen**) durch die Fläche des **Rings** der Breite Δr im Abstand r ersetzt werden, d.h. das Flächenelement heißt jetzt $\Delta F(r) = 2\pi \cdot r \cdot \Delta r$ (= Umfang der Kreises mit Radius r mal "Höhe" - gut genug für differentiell kleine Δr). Dies ist unten graphisch dargestellt (wobei wir $\Delta = "d"$) um anzudeuten daß wir immer differentiell kleine Änderungen meinen).

- Drei**dimensional fragen wir nur noch nach der Wahrscheinlichkeit, daß \underline{r} irgendwo in der Kugelschale zwischen $|\underline{r}|$ und $|\underline{r}| + \Delta|\underline{r}|$ endet. Das cartesische Volumenelement $\Delta \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \Delta x \Delta y \Delta z$ wird zu $\Delta V(r) = 4\pi \cdot r^2 \cdot \Delta r$. Für die Wahrscheinlichkeit, r irgendwo zwischen r und $r + \Delta r$ zu finden gilt entsprechend der [obigen Ableitung](#) für den **zweidimensionalen** Fall

$$w_N(r) \cdot \pi r \cdot \Delta r = W_N(r) = \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^1 \cdot \exp - \left(\frac{x^2 + y^2}{2N} \right) \cdot 2\pi r \cdot \Delta r = \frac{r \cdot \Delta r}{2N} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N}$$

- Wir haben ein Produkt einer ansteigenden Geraden mit einer abfallenden Exponentialfunktion
- Das sieht ungefähr so aus -
- Wiederum ist die Verteilungskurve nur für positive Werte von r definiert, und wenn alles stimmt, muß das Integral über die Kurve = 1 sein



Damit haben wir jetzt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auftreten gewisser Abstände r vom Ursprung - für den **ein- und zweidimensionalen Fall** siehe den [Link](#).

- Die Formel zur Berechnung des **Mittelwerts** von r^2 bei gegebener Verteilung $w(r)$ lautet in der bekannten Integralformel für Mittelwerte:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int r^2 w(r) dr}{\int w(r) dr} = \int_{-\infty}^{+\infty} r^2 w(r) dr$$

- Dabei ist mitgenommen, dass der Wert des Nenners per Definition = 1 sein muß. Die Integrationen laufen selbstverständlich alle von $-\infty$ bis $+\infty$

Die Größe hat zentrale Bedeutung und deshalb einen eigenen Namen, sie heißt "**Mittleres Verschiebungssquadrat**".

- Damit ist die Frage nach den **Mittelwerten** im Prinzip gelöst; die entsprechenden Formeln finden sich in einer [gesonderten Tabelle](#).

3. Wir können aber auch fragen: In welchem Abstand $|r|_{\text{wahr}}$ (wieder nur Betrag bei r ; wir lassen die Betragsstriche aber zukünftig weg!) ist die **Wahrscheinlichkeit**, das Teilchen zu finden am höchsten? Wir fragen nach dem **wahrscheinlichsten Abstand**.

- Das ist die Frage nach dem **Maximum** der Funktion $w(r)$. Die obige Figur zeigt, daß ein Maximum vorhanden ist; die Frage ist also sinnvoll.
- Daß **wahrscheinlichste Werte** und **Mittelwerte** ganz verschieden sein können, sieht man sofort ein, wenn man sich fragt, was das **wahrscheinlichste** und das **mittlere** Gehalt einer Gruppe von 100 Personen ist, in der 95 Personen € 2.000.- pro Monat verdienen, und 5 Personen € 20.000.000.- pro Monat bekommen.
- Eine Antwort findet sich in einem [eigenen Modul](#) und in der [großen Tabelle](#).

4. Wir können weiterhin fragen, bei welchem r die Wahrscheinlichkeitsverteilung eine **bestimmte Breite** hat, oder andersherum, wie groß die **Halbwertsbreite**, d.h. die Breite (ausgedrückt in r) in halber Höhe ist? Oder ganz allgemein, wie die Breite der Verteilung von den Parametern (hier N) abhängt.

Alle diese Fragen sind sinnvoll und haben wichtige Bedeutungen. Sie sind in weiteren Modulen behandelt. Der **wahrscheinlichste Abstand beim dreidimensionalen "Random Walk"** ist ausführlich dargestellt, die Gesamtheit der Fragen und Antworten [tabellarisch](#).

Random Walk und Diffusion

Die letzte Frage ist jetzt: Wie hängen der **Diffusionskoeffizient** und die oben betrachteten Größen $\langle r^2 \rangle$ oder r_{wahr} zusammen? Ein Zusammenhang **muß** existieren, da wir letztlich mit dem "Random Walk" und den Diffusionsgleichungen der Fickschen Gesetze sehr ähnliche Abläufe beschreiben.

- Um diesen Zusammenhang zu erhalten müssen wir uns nur klar machen, daß wir mit der Herleitung der obigen Formeln für den "Random Walk" ein sehr allgemeines Diffusionsproblem gelöst haben. Wir haben betrachtet, wie sich eine Konzentration an Teilchen, die zum Zeitpunkt $t = 0$ **alle** bei $(x, y, z) = 0$ zu finden waren, im Laufe der Zeit im gesamten Volumen einstellt, d.h. wir haben eigentlich das 2 Ficksche Gesetz für die Randbedingung einer Anfangsverteilung in Form einer δ -Funktion gelöst **ohne es zu kennen oder vorauszusetzen**. Mit den in der [tabellarische Darstellung](#) gegebenen Funktionen kennen wir jetzt die Konzentrationsverteilung für **alle** Dimensionen.
- Wir müssen jetzt nur noch das 2 Ficksche Gesetz für diese Bedingungen **formal** lösen, und diese Lösung mit der hier gegebenen vergleichen. Dabei rechnen wir die Konzentration c , die im Fickschen Gesetz auftritt, über folgende Beziehung auf die Wahrscheinlichkeiten um, die wir hier abgeleitet haben:
- $w(r, t)$ = Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zur Zeit t im Intervall $r, r + dr$ zu finden = Zahl der Teilchen bei (r, t) / Zahl aller Teilchen, oder

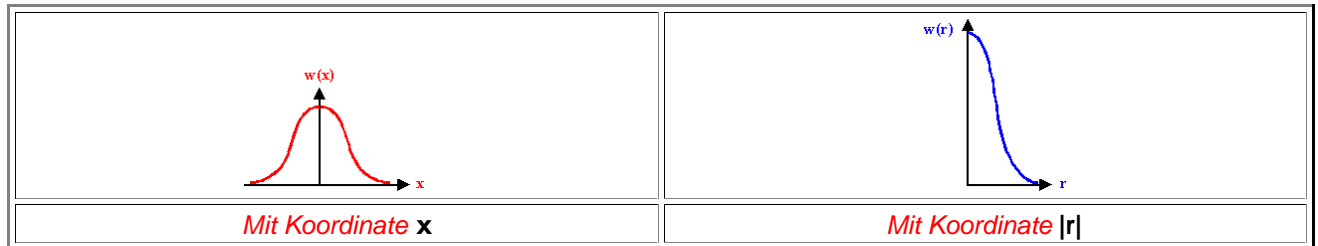
$$w(r, t) = \frac{c(r, t)}{\int c(r, t) dr}$$

Es genügt der eindimensionale Fall. Welcher Randbedingung entspricht unser Würfelexperiment? Da $\int w(r)$ immer = 1 ist, haben wir offenbar eine bestimmte Anzahl von Teilchen, die bei $t = 0$ alle bei $r = 0$ waren; d.h. eine durch eine δ -Funktion symbolisierte Quelle im Inneren eines Körpers.

- Die entsprechende Lösung des **eindimensionalen** 2. Fickschen Gesetzes geben wir sowohl mit x als Koordinate, als auch mit $|r|$ als Koordinate an - dies ist sehr lehrreich und hilft, die oft vorliegende Konfusion zu vermeiden.

$w_N(x)dx \mid_{2.FG} = \left(\frac{1}{\pi 4D \cdot t} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left(\frac{x^2}{4D \cdot t} \right)$	$w_N(r)dr \mid_{2.FG} = \left(\frac{1}{\pi D \cdot t} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left(\frac{r^2}{4D \cdot t} \right)$
Mit Koordinate x	Mit Koordinate $ r $

- Graphisch sieht das so aus (immer bedenken: Es gibt keine negativen $|r|$; daher der **Faktor 2** im eindimensionalen Volumenelement dr



- Aus der Betrachtung des **eindimensionalen** "Random Walks" erhielten wir für $|r|$:

$w_N(r)dr \mid_{RW} = \left(\frac{2}{a_0^2 \pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left(\frac{r^2}{2Na_0^2} \right)$

- Aus einem Vergleich des Exponentens **oder** des Vorfaktors erhalten wir sofort:

$2Dt = N \cdot a_0^2$ <p style="text-align: center;">oder</p> $D = \frac{v \cdot a_0^2}{2}$ <p style="text-align: center;">(v = Sprungrate = N/t)</p>

- Das ist die bereits abgeleitete Beziehung für den **rein eindimensionalen** Fall (d.h. ohne Sprünge in y - oder z -Richtung; so daß nicht $1/6$ sondern $1/2$ der Sprünge in die betrachtete x -Richtung führen).

Das ist zwar erfreulich, aber **noch nicht was wir wollten**. Um einen Zusammenhang zwischen dem Mittelwert $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ von r , oder dem wahrscheinlichsten Wert (r_{wahr}) von r und dem Diffusionskoeffizienten zu bekommen, müssen wir jetzt aber **nur noch** die gewünschte Größe aus der Lösung des 2. Fickschen Gesetzes berechnen, da wir soeben gezeigt haben, daß diese Lösung vollständig äquivalent zur Betrachtung mit Hilfe der reinen Statistik, des "Random Walks" ist.

- Wir müssen

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \cdot w(x) dx$$

(von 0 bis ∞). berechnen. Dieses Integral ist im Tabellenmodul gelöst, das Ergebnis ist

$\langle r^2 \rangle = Na_0^2 = 2Dt$
$\langle r \rangle = L = (2Dt)^{1/2}$

- Für r_{wahr} bekommen wir, mit den Wert aus der Tabelle für **eindimensionale** Diffusion schlicht und ergreifend **$r_{\text{wahr}} = 0$**
Es ist am wahrscheinlichsten, ein Teilchen am Ursprung zu finden. Daran ändert sich auch nichts mit fortschreitender Zeit - obwohl der mittlere Abstand der Teilchen vom Ursprung immer größer wird.

Damit ist die **eindimensionale** Diffusion erledigt. Aber damit haben wir noch **nicht** - auch nicht **im Prinzip** - die **zwei** und **drei**dimensionale Diffusion erledigt!

- Im Gegensatz zu vielen anderen physikalischen Phänomenen, bei den die Dimensionalität für das **Prinzip** dessen was passiert **keine** große Rolle spielt, gilt das **nicht** für die Diffusion:
- In der **eindimensionalen** Diffusion ist $r_{\text{wahr}} = 0$ - die Teilchen kommen nicht so recht vom Fleck. Das gilt nicht für höhere Dimensionen. Die Teilchen sind nicht mehr mit größter Wahrscheinlichkeit an der Quelle zu finden, und r_{wahr} ist nicht mehr Null sondern wächst mit der Wurzel aus der Zeit bzw. Sprungzahl - siehe die [Tabelle](#)

Den Zusammenhang zwischen Diffusionskoeffizient **D** und Diffusionslänge **L** für **zwei**- und **drei**dimensionale Diffusion bekommt man sofort aus der Überlagerung der eindimensionalen Lösungen. Dabei setzen wir aber voraus, daß die Diffusion isotrop erfolgt, oder anders ausgedrückt, das **D** ein Skalar und kein Tensor zweiter Stufe ist.

- Wir erhalten damit
 - Eindimensional**: $D = L^2/2t$
 - Zweidimensional**: $D = L^2/4t$
 - Dreidimensional**: $D = L^2/6t$

Wahrscheinlichster Abstand beim dreidimensionalen "Random Walk"

Advanced

Wenn wir nicht wie bei der [Ableitung der Einstein - Smoluchowski](#) Beziehung nach $\langle r^2 \rangle$, oder eindimensional nach $\langle x^2 \rangle$, fragen, sondern nach dem **wahrscheinlichsten** r , müssen wir eine andere Betrachtung anstellen.

Wir kennen die (absolute) Wahrscheinlichkeit $W(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \cdot \Delta V$, das Teilchen im Volumenelement ΔV bei $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ zu finden; $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ ist die [Wahrscheinlichkeitsdichte](#). Wir wollen aber **nur** die Wahrscheinlichkeit als Funktion des Abstandes r vom Ursprung.

- Das heißt, wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in dem Volumen einer Kugelschale mit der Dicke Δr im Abstand r zu finden; wir müssen für ΔV das Volumen also das Volumen der differentiell dünnen Kugelschale einsetzen und entsprechend zu Polarkoordinaten übergehen. Im Exponent von $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ ist das einfach; dort steht schon $r^2 = (x^2 + y^2 + z^2)$.
- Es bleibt noch ΔV in Polarkoordinaten auszudrücken; wir haben das bei [Wellenfunktionen schon mal betrachtet](#). Für die gewünschte Kugelschale gilt:
 $\Delta V = \text{Oberfläche der Kugel mit Radius } r \text{ multipliziert mit } \Delta r$, der Dicke der Schicht (für Δr gegen 0) oder
 $\Delta V = 4\pi \cdot r^2 \cdot \Delta r$
- Damit erhalten wir zunächst für die absolute Wahrscheinlichkeit des radialsymmetrischen **dreidimensionalen** "Random Walks" $W(r) = W'(r) \cdot \Delta r$ mit $W'(r) = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte für den radialsymmetrischen Fall}$. Ausgeschrieben haben wir:

$$W(r) = W'(r) \cdot \Delta r = 4\pi \cdot r^2 \cdot \left(\frac{1}{2\pi \cdot N} \right)^{3/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$$

oder

$$W'(r) \cdot \Delta r = \frac{2r^2}{N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$$

Was ist nun der **wahrscheinlichste** Abstand? Offenbar der spezielle Wert r_{wahr} , für den $W'(r)$ ein Maximum hat, d.h. $dW'/dr = 0$ gilt.

- r_{wahr} ist nun schnell berechnet. Es gilt (mit $(1/2\pi N)^{1/2} = b$) um Schreibarbeit zu sparen

$$\frac{dW'(r)}{dr} = \left(\frac{4b \cdot r}{N} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \right) - \left(\frac{2b \cdot r^3}{N^2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \right) = 0$$

Daraus ergibt sich

$$r_{\text{wahr}} = (2N)^{1/2}$$

Ein, nach der langen Rechnerei, **erstaunlich simples Ergebnis** für den dreidimensionalen Fall. Wir können r_{wahr} wie gehabt jetzt auch sofort als Funktion der physikalischen Sprungweite a und/oder der Sprungfrequenz ν ansetzen.

- Zunächst zur Sprungweite a . Bei unserer Betrachtung haben wir einen Sprung der Einheit "1" angenommen, springt das Teilchen stattdessen a cm, müssen wir mit a multiplizieren und erhalten

$$r_{\text{wahr}} = a \cdot (2N)^{1/2}$$

- Die Zahl der Sprünge ist gegeben durch $N = \text{Sprünge pro Sekunde mal Zeit} = \nu \cdot t$. Damit erhalten wir für als Funktion der Sprungfrequenz ν und der verstrichenen Zeit t

$$r_{\text{wahr}} = a \cdot (2\nu \cdot t)^{1/2}$$

Wir haben in anderem Zusammenhang bereits die Diffusionslänge L , d.h. den **mittleren** Abstand $\langle r \rangle$ nach N Sprüngen berechnet; [das Ergebnis war](#) (für **dreidimensionale** Diffusion)

$$\langle r \rangle = L \cdot a \cdot (3N)^{1/2}$$

- Die Diffusionslänge L und der wahrscheinlichste Abstand r_{wahr} sind sich im dreidimensionalen also recht ähnlich und werden oft nicht mehr deutlich unterschieden.
- Das gilt aber überhaupt nicht für eindimensionale Diffusion! Man muß also immer aufpassen, welche Fälle man betrachtet.

Eigenschaften des Random Walks in ein- zwei- und drei Dimensionen

Advanced

			Eindimensional	Zweidimensional	Dreidimensional
(1)	Wahrscheinlichkeitsdichte Teilchen nach N Sprüngen bei (x,y,z) zu finden mit Sprungweite "1" .	$w(x,y,z)$ =	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right) \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{3/2} \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2N}$
(2)	Breite auf 0,607 facher (= $e^{-1/2}$) Höhe = 2σ		$\sigma_x = N_x^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$ $\sigma_z = N_z^{1/2}$
(2a)	Damit: "Normaldarstellung" von (1)	$w(x,y,z)$ =	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right) \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{3/2} \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}$
(3)	Volumenelement ΔV bei Übergang zu Abständen r	$\Delta V =$	$2\Delta r$ (der Faktor 2 ist wichtig!)	$2\pi r \Delta r$	$4\pi r^2 \Delta r$
(4)	Absolute Wahrscheinlichkeit $W(r)$, Teilchen im Abstandsintervall r, r + Δr zu finden mit dimensionloser Sprungweite "1" W'(r) ist die Wahrscheinlichkeitsdichte bezogen auf Abstände	$W(r) =$ $w(r)\Delta V$ $= W'(r)\Delta r$	$\left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{N}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$
(5)	Absolute Wahrscheinlichkeit Teilchen im Abstandsintervall r, r + Δr zu finden mit Sprungweite a₀ cm	$W(r,a_0) =$ $w(r,a_0)\Delta V$ $= W'(r)\Delta r$	$\left(\frac{2}{a_0^2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{Na_0^2}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$
(6)	Mittleres Verschiebungsquadrat $\langle r^2 \rangle = \int r^2 W'(r,a_0) dr$ (mit Sprungweite a₀ cm) = Diffusionslänge L	$\langle r^2 \rangle =$	$N \cdot a_0^2$	$2N \cdot a_0^2$	$3N \cdot a_0^2$
(6a)	Diffusionslänge L = $\{\langle r^2 \rangle\}^{1/2}$	L =	$a_0 N^{1/2}$	$a_0 (2N)^{1/2}$	$a_0 (3N)^{1/2}$
(7)	Mittleres Verschiebungsquadrat mit dimensionloser Sprungweite "1"	$\langle r^2 \rangle =$	N	2N	3N
(8)	Wahrscheinlichstes r_{wahr} aus dW/dr(r_{wahr}) = 0 (mit Sprungweite "a ₀ ")	r_{wahr} =	0	$a_0 \cdot N^{1/2}$	$a_0 (2N)^{1/2}$ siehe auch den Link

Erklärungen und Mathematik

1. Sprungweiten

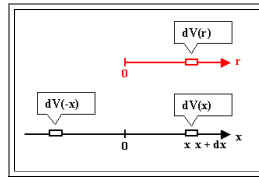
- Solange wir nur Würfelspiele betrachten, gibt es keine Sprungweiten. Assoziieren wir das gewürfelte Ergebnis mit der Bewegung von irgendetwas ("bei +1 **eins** nach rechts, bei -1 **eins** nach links"), haben wir die dimensionlose Sprungweite **"1"**
- Ist die Sprungweite jedoch eine physikalische Größe, d.h. zum Beispiel **a₀ cm**, müssen wir **a₀** wie folgt in die Formel einbauen
 - r [Zahl]** wird ersetzt durch **r / a₀**
 - dr [Zahl]** wird ersetzt durch **1/a₀ · dr**
- Es ist erkennbar sehr wichtig, auch beim **dr** das **1/a₀** nicht zu vergessen!

2. "Halb"wertsbreite

- Die Breite der Gaußkurve auf "ungefähr" halber Höhe heißt **2σ**, hat einen besonders einfachen Wert (und markiert die Wendepunkte der Kurve).
- Häufig benutzt man den numerischen Wert für **σ** als ein Maß für die Streuung eines Parameters, z.B. bei Meßwerten, die einer Gaußverteilung gehorchen.
- Unter Benutzung von **σ** lassen sich die Funktionen einfacher schreiben, man spricht von der Normalform der Gaußverteilung.

3. Volumenelement

- Wir beziehen uns nur auf **Abstände**. Die Volumenelemente sind dann
 - Eindimensional**: Das Intervall $r, + dr$ auf der Abstandsachse r
 - Zweidimensional**: Die Fläche zwischen den Kreisen mit Radius r und $r + dr$ - ein Ringsegment
 - Dreidimensional**: Das Volumen zwischen den Kugeln mit Radius r und $r + dr$ - ein Kugelsegment oder eine "Zwiebelschale"
- Ein beliebiger Fehler beim Übergang von cartesischen Koordinaten zu Polarkoordinaten für den **eindimensionalen** Fall liegt im Übersehen des Faktors "2" in der Beziehung $dV = 2 dr$, den **ein** Wert für $r = |x|$ deckt sowohl den Wert $+x$ als auch $-x$ ab, wie die nachfolgende Zeichnung klar macht.



- Es gibt keine negativen Abstände und damit keine negativen r . Teilchen die sich im "Volumen"element bei x oder bei $-x$ befinden, sind alle im Volumenelement bei $r = |x|$.
- Der hier eventuell einfließende Fehler mag sich kompensieren (oder verstärken?), wenn man einen anderen Faktor 2 Fehler macht, indem man Standardlösungen der Fickschen Diffusionsgleichungen, die fast immer für einen Halbraum gegeben werden (d.h. aus der Quelle diffundieren die Teilchen nur nach links **oder** nur nach rechts; die Quelle sitzt auf der Oberfläche), mit den Random walk Ergebnissen vergleicht, bei denen die Teilchen nach rechts **und** nach links diffundieren können (die Quelle sitzt im Inneren).

4. und 5. Absolute Wahrscheinlichkeit und Wahrscheinlichkeitsdichten

- Die **absolute** Wahrscheinlichkeit für irgendetwas muß sich immer auf ein endliches (wenn auch differentiell kleines) Volumen beziehen. Denn die absolute Wahrscheinlichkeit, eine **endliche** Anzahl von irgendetwas bei einem von **unendlich** viel mathematischen Punkten zu finden ist immer **= 0**.
- Sind die Variablen in Wahrheit diskret (z.B. beim Würfelspiel, wo man schlicht keine **3,27** oder **7,005** würfeln kann), muß man immer die **Wahrscheinlichkeitsdichte** über das Intervall um die diskrete Variable herum integrieren. Die Wahrscheinlichkeit eine **7** zu würfeln ist dann beispielsweise

$$w(7) = \int_{6,5}^{7,5} w(r) \cdot dV$$

- Die angegebene Formel erhält man also einfach durch Multiplikation der Formeln in Reihe 1 mit den Formeln in Reihe 3.
- Nach der Umrechnung auf Wahrscheinlichkeiten für **Abstände** übernimmt $W'(r) = W(r)/\Delta r$ die Rolle der Wahrscheinlichkeitsdichte - es ist jetzt eine **radiale Wahrscheinlichkeitsdichte**.

6. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite a_0

- Diese Integrale können leicht berechnet werden indem man sie auf eine Form bringt, die in Tabellen zu finden ist. Der jeweilige Wert des Integrals ist in der Formel durch **rote Schrift** immer getrennt ausgewiesen.

Eindimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \pi N} \right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty r^2 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot \frac{\pi^{1/2}}{2k^{3/2}}$$

- Mit $k = 1/2Na_0^2$ erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot N \cdot a_0^3 \cdot \left(2\pi \cdot N \right)^{1/2} = N \cdot a_0^2$$

Zweidimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2} \right) \cdot \int_0^\infty r^3 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2} \right) \frac{1}{2k^2}$$

- Mit

$$k = \frac{1}{2 \cdot N \cdot a_0^2} ; \quad \frac{1}{2k^2} = \frac{4 \cdot N^2 \cdot a_0^4}{2} = 2 \cdot N^2 \cdot a_0^4$$

Damit ergibt sich

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N \cdot a_0^2} \cdot 2N^2 \cdot a_0^4 = 2N \cdot a_0^2$$

Dreidimensional

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty r^4 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr$$

Mit

$$k = \frac{1}{2N \cdot a_0^2} \quad \text{und} \quad \int_0^\infty = \frac{3\pi^{1/2}}{8 \cdot k^{5/2}} = \frac{3\pi^{1/2} \cdot (2N \cdot a_0^2)^{5/2}}{8}$$

erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = 3 \cdot a_0^2 \cdot N$$

Es ist immer gut, mal die Integration zu üben, *aber das ganze hätte man natürlich auch einfacher haben können:*

Da die Hüpe in x -, y - und z -Richtung unabhängig voneinander sind, und deshalb $N_x = N_y$ sein muß, gilt

$$\begin{aligned} \langle r^2(x,y) \rangle &= \langle r^2(x) \rangle^2 + \langle r^2(y) \rangle^2 \\ &= (N_x a_0^2) + (N_y a_0^2) \\ &= 2N a_0^2 \end{aligned}$$

Für den dreidimensionalen Fall folgt entsprechend

$$\langle r^2(x,y) \rangle = 3 \cdot N \cdot a_0^2$$

Unnötige Arbeit gemacht? Nein - nur dadurch läßt sich prüfen, ob die Ausgangsformeln stimmen (so wurden die diversen Fehler in Büchern entdeckt).

7. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite "1"

Das ist jetzt einfach: Ersetzen wir $N \cdot a_0^2$ in den Formeln in 6. durch N , ist die Mathematik identisch - d.h. wir müssen bei $\langle r^2 \rangle$ nur N statt $N \cdot a_0^2$ einsetzen.

8. Wahrscheinlichstes r

Der wahrscheinlichste Abstand r_{wahr} ist der Abstand, bei dem wir erwarten können die *meisten* Teilchen zu finden. Daß das nicht derselbe Abstand ist wie der *mittlere* Abstand $\langle r \rangle = \{ \langle r^2 \rangle \}^{1/2}$ wurde schon [anderweitig klargemacht](#).

r_{wahr} ergibt sich offensichtlich aus dem Maximum der Verteilungskurve, d.h. wir haben

$$\frac{dw}{dr} (r = r_{\text{wahr}}) = 0$$

Wir bekommen:

Eindimensional:

$$\left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot \frac{d}{dr} \left(\exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \right) = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot - \left(\frac{r}{Na_0^2}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} = 0$$

● Und damit ganz schnell

$$r_{\text{wahr}} = 0$$

🔺 *Zweidimensional*

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{r}{N \cdot a_0^2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} \right) = 0$$

● Und damit

$$r_{\text{wahr}} = a_0 \cdot N^{1/2}$$

🔺 *Dreidimensional*

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{2r^2}{a_0^3 \cdot N} \left(\frac{1}{2\pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} \right) = 0$$

● Und damit

$$r_{\text{wahr}} = a_0 \cdot (2N)^{1/2}$$

🔺 Während r_{wahr} und der Mittelwert von r , also die Diffusionslänge L , bei eindimensionaler Diffusion fundamental verschieden sind, ist der Unterschied für dreidimensionale Diffusion vernachlässigbar. Für Diffusion in hohen Dimensionen - was immer das sein mag - wird der Unterschied offenbar immer kleiner.

Kurzfassung der Ableitung der Gauss Verteilung

Random Walk, Gauß Verteilung und die Einstein - Smoluchowski Beziehung -

Vom Würfeln zur Gaußverteilung

Advanced

In diesem Modul werden wesentliche statistische Funktionen unmittelbar vom Würfeln abgeleitet - und zwar *in Kurzform*, ohne ausführliche Herleitung der Formeln.

- Die ausführliche Herleitung mit einer eingehenden Diskussion aller Herleitungen, Tricks und Fallstricke, findet sich in einem [anderen Modul](#).
- Aus Gründen der Schreibökonomie (und der besseren Lesbarkeit) wird hier auf die *Kursiv*schreibung der Variablen verzichtet.

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit $w_N(x)$, mit N Würfeln, die alle binär sind, d. h. nur $+1$ oder -1 als Augenzahl haben, mit einem Wurf eine Summe x zwischen $-N$ und $+N$ zu würfeln. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit ist

- $w_N(x) = (\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}) / (\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}) = P_x / P_N$.
- Nach relativ länglichen Überlegungen bei denen man sich [mit Leichtigkeit vertut](#), erhält man

$$w_N(x) = \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (x + N)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

- Diese Formel liefert, und das ist wichtig, nur Antworten falls N und x beide geradzahlig *oder* beide ungeradzahlig sind.

Mit der Langversion der [Stirlingschen Formel](#) für Fakultäten

$$\ln N! \approx (N + 1/2) \ln N - N + \ln(2\pi)^{1/2}$$

- [erhält man](#) als Antwort (und als Näherung) die **Gaußsche Normalverteilung**

$$w_N(x) \approx \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$$

Dabei hat sich aber eine subtile qualitative Änderung eingeschlichen:

- In der ursprünglichen Frage waren nur *ganzzahlige positive* N und ganzzahlige x zugelassen (es gibt keine $N = -3,7$ Würfel, und man kann auch nicht $x = 2,8$ würfeln); alle möglichen Antworten $w_N(x)$ waren unmittelbare **absolute Wahrscheinlichkeiten** (d.h. eine Zahl zwischen 0 und 1).
- Das $w_N(x)$ in der Gaußsche Normalverteilung ist aber auch für *beliebige* N und x eine wohldefinierte Funktion!
- $w_N(x)$ ist damit keine *absolute* Wahrscheinlichkeit mehr, sondern eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** (und deswegen jetzt kleingeschrieben).

Die absolute Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Ereignisses, erhält man indem man $w_N(x)$ über das betrachtete Intervall integriert. Für $w_N(x = 7)$ erhält man zum Beispiel

$$w_N(x = 7) \approx \int_{6,5}^{7,5} \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dx$$

- Für kleine Intervalle Δx , in denen sich $w_N(x)$ nicht nennenswert ändert, gilt dann für die *absolute* Wahrscheinlichkeit $W_N(x)$ des Auftretens des gesuchten Ereignisses

$$W_N(x) = w(x) \cdot \Delta x$$

- Die Gaussverteilung liefert im übrigen auch Werte für beliebige Kombination für **N** und **x**, z.B. **N** geradzahlig und **x** ungeradzahlig - was die Ausgangsformel nicht tut.
 - Das muß bei der Herleitung gebührend berücksichtigt werden.
- Der Bezug vom Würfeln zur **eindimensionalen** Diffusion ist einfach:
 - Für **+1** rücken wir **a cm** nach rechts, für **-1**, **a cm** nach links. **a** ist die Schrittweite, und wir müssen in den obigen Formel nur **x** durch **x·a** ersetzen um sofort die Lösung des **eindimensionalen** Diffusionsproblems zu haben
- Zwei-** und **drei-**dimensionale Diffusion erhält man durch Kombination, da die Bewegung auf jeder Achse unabhängig von den anderen ist. Wir haben
 - Zweidimensional:** $w_N(x, y) = w_N(x) \cdot w_N(y)$
 - Dreidimensional:** $w_N(x, y, z) = w_N(x) \cdot w_N(y) \cdot w_N(z)$
 Die ausgeschriebenen Gaußverteilungen finden sich im Link
- Wir sind nun in der Lage einige Fragen zu stellen und zu beantworten

Gaußverteilung und Diffusionsparameter

- Erste Frage:** Was ist der Mittelwert $\langle \underline{r} \rangle$ aller **Abstände** $\underline{r} = (x, y, z)$ die wir (bei punktförmiger Quelle) nach **N** Schritten finden?
 - Das heißt wir fragen nach dem **Mittelwert der Vektoren**, die den Startpunkt (= **(0, 0, 0)**) mit dem Endpunkt **(x, y, z)** verbinden, wenn wir ein "Würfelldiffusionsexperiment" genügend oft wiederholen um einen sinnvollen Mittelwert definieren zu können.
 - Die Antwort ist einfach:

$$\langle \underline{r} \rangle = \underline{0},$$
 denn für jeden beliebigen Vektor \underline{r} der irgendwo endet werden wir mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch den entgegengesetzten Vektor $-\underline{r}$ finden - die **Summe aller Vektoren** wird damit = **0**.
- Zweite Frage:** Was ist der Mittelwert $\langle |\underline{r}| \rangle$ der **Beträge** aller Abstandsvektoren, die wir nach genügend viel Versuchen finden. Diesen Mittelwert nennen wir die **Diffusionslänge L**. Ein feiner, aber **essentieller** Unterschied zur ersten Frage.
 - Die Frage ist gleichbedeutend zu der Frage nach dem **mittleren Verschiebungsquadrat**

$$\langle \underline{r}^2 \rangle = \langle |\underline{r}|^2 \rangle = \langle r^2 \rangle = L^2,$$
 da wir aus diesem Ergebnis nur die (positive) Wurzel ziehen müssen um unsere Frage zu beantworten
 - Die Antwort folgt aus den Gaußverteilungen für die diversen Dimensionen; wir haben Integrale der Form

$$\langle r^2 \rangle = L^2 = \int_0^\infty \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dV$$
 zu lösen; **dV** ist dabei das betrachtete **Volumenelement**.
 - Dieses Volumenelement hat es in sich. Da wir für den Betrag des Vektors \underline{r} immer schreiben können $\underline{r} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, werden die Volumenelemente
 - Eindimensional:** $dV = dr = 2dx$ - der Abstand nach links **und** nach rechts.
 - Zweidimensional:** $dV = 2\pi r \cdot dr$ - das Kreissegment der Dicke **dr** im Abstand **r**.
 - Dreidimensional:** $dV = 4\pi r^2 \cdot dr$ - die "Zwiebelschale" der Dicke **dr** im Abstand **r**.
 - Multipliziert man die **Wahrscheinlichkeitsdichte** $w_N(x)$ mit diesen Volumenelementen, erhält man eine neue **radiale Wahrscheinlichkeitsdichte** $W'(r)$, die nur noch $|\underline{r}| = r$ als Variable hat, über $w_N(x, y, z) \cdot dV = W'(r) \cdot dr$
 - Die Integrale werden etwas anstrengend, das Ergebnis aber ist einfach:
 - Eindimensional:** $L = a \cdot (N)^{1/2}$
 - Zweidimensional:** $L = a \cdot (2N)^{1/2}$
 - Dreidimensional:** $L = a \cdot (3N)^{1/2}$

Dritte Frage: Was ist der **wahrscheinlichste** Wert $|r|_{\text{wahr}}$ den wir nach genügend viel Versuchen finden werden - in welchem Abstand $|r|_{\text{wahr}}$ finden wir die meisten Teilchen? Das ist die Frage nach dem **Maximum** der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte (und eine ganz andere Frage als die Frage nach dem Mittelwert).

- Wir müssen dazu das Maximum der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte $W'(r)$ bestimmen, d.h. die Gleichung $dW'(r)/dr = 0$ lösen.
- Das Ergebnis ist
 - **Eindimensional:** $|r|_{\text{wahr}} = 0$
 - **Zweidimensional:** $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (N)^{1/2}$
 - **Dreidimensional:** $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (2N)^{1/2}$

Man sollte also L und $|r|_{\text{wahr}}$ bei eindimensionaler Diffusion nicht verwechseln, während es bei dreidimensionaler Diffusion fast egal ist.

Diffusionskoeffizient und Random Walk

Die Betrachtung des Random walks als Diffusionsproblem führt auf eine Konzentrationsverteilung der diffundierenden Teilchen als Funktion der Schrittzahl N und Schrittweite a für den Fall einer in einen homogenen Körper eingeschlossenen Punktquelle.

- Diese Konzentrationsverteilung muß identisch sein zu der Konzentrationsverteilung die sich aus der entsprechenden Lösung der Fickschen Gesetze ergibt. Der Vergleich führt sofort auf
 - **Eindimensional:** $D = L^2/2t$
 - **Zweidimensional:** $D = L^2/4t$
 - **Dreidimensional:** $D = L^2/6t$
- Vorausgesetzt, der Diffusionskoeffizient D ist ein Skalar, und nicht wie im allgemeinsten Fall, ein **Tensor 2 Stufe**.
- Hier kann eine kleine Konfusion auftreten: Die obigen Gleichungen gelten völlig losgelöst von den Hüpfmechanismen - wir setzen nur isotropes Verhalten voraus, aber nicht wie viele Möglichkeiten eine Leerstelle tatsächlich hat, um von ihrer Position aus auf eine Nachbarposition zu springen.
 - Aber aus so einer Betrachtung heraus haben wir auch schon, und ganz unabhängig von Random walk Betrachtungen, den Diffusionskoeffizienten abgeleitet - in [Kapitel 6.2.3](#). Ist hier etwas überbestimmt?
 - **Nein** - nicht solange die Hüpferei isotrop erfolgt. Und fall sie das **nicht** tut - z.B. in nicht-kubischen Kristallen, ist D kein Skalar mehr und die Kristallgeometrie gibt die Vorgabe für die differenzierte Betrachtung

Flächen- und Volumendichten

Das ist ein kleiner Anhang aus dem Hyperscript "Semiconductors". Er enthält alles, was man zur Thematik wissen sollte

Basics

Changing from *volume* to *surface concentrations* might be a bit confusing, especially for mathematicians.

- If you imagine a distribution of (mathematical) points in space with an average density of n_v , and then ask how large is the density n_s of points on an arbitrary (mathematical) plane stretching through the volume, the answer is $n_s = 0$, because mathematical points are infinitely small and mathematical planes infinitely thin - you never will cut a point with a plane this way.
- Our points, however, are atoms* - they are not infinitely small. Our planes are not infinitely thin either, their minimal useful thickness corresponds to the size of an atom, or to a lattice constant.

So in computing a *surface density of atoms*, you can do two things:

1. You actually count the atoms lying on the chosen plane of the crystal (making sure you know if you want your density for a *lattice plane* or for *crystallographically equivalent sheets of atoms in a crystal*)
- This is *not* the same: the density of atoms on a $\{100\}$ *atomic layer* of a fcc crystal is only 1/2 of that of a $\{100\}$ *lattice plane*; if you don't see it, *make a drawing!*
2. You just take the atoms contained in a sheet with thickness a . For an area of $S \text{ cm}^2$ its volume thus is $A \cdot a$. Since a volume of 1 cm^3 contains n_v particles, a volume of $A \cdot a$ contains $n_v \cdot A \cdot a$ particles; the surface density n_s thus is

$$n_s = \frac{n_v \cdot A \cdot a}{A} = n_v \cdot a$$

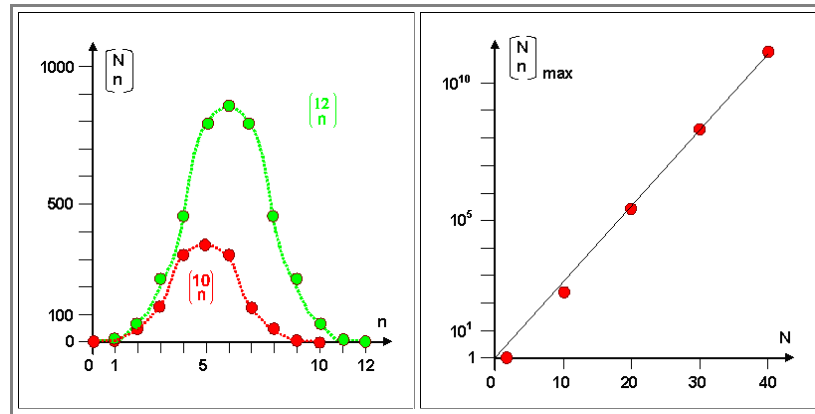
Binomialkoeffizient

- Der Binomialkoeffizient kommt in vielen mathematischen Formeln vor, insbesondere in der Stochastik, so dass er einen eigenen Namen und eine eigene Abkürzungen bekommen hat
- Der Binomialkoeffizient zweier (ganzer und nicht negativer) Zahlen N und n ist wie folgt definiert

$$\binom{N}{k} = \text{Binomial Koeffizient} = \frac{N!}{(N-k)! \cdot k!}$$

Basics

- Wie sieht ein zugehöriger Graph aus? Etwa so:



- Man erhält immer eine Art Glockenkurve, mit dem Maximum bei $n = N/2$.
- Das Maximum wächst sehr rasch, nämlich exponential für nicht zu kleine N , wie im linken Graph gezeigt.
- Mit Hilfe der [Stirlingformel](#) kann man den Binomialkoeffizient etwas zu Leibe rücken und findet dann schlicht und wohl nicht ganz überraschend:
 - Um das Maximum herum erhalten wir schlicht die Gauss-Verteilung.

Übung 6.2-1: Diffusion von Atomen

 Wir behelfen uns hier mit einer [ähnlichen Aufgabe](#) aus dem "Defects" Hyperskript

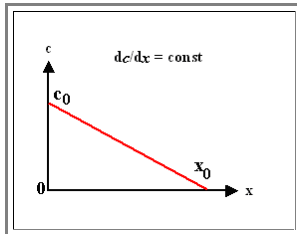


Lösung

Nachdenkübung 6.2-2: Konstanter Strom ohne Änderung der Konzentration?

Das [2. Ficksche Gesetz](#) lautet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta c$$



Für das gezeigte Konzentrationsprofil mit $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0$ würden damit keine zeitlichen Änderungen der Konzentrationen eintreten, obwohl ein konstanter Diffusionsstrom $j = -D \cdot \text{const.}$ fließt, der ständig Teilchen nach links transportiert?

Wie ist dieser scheinbare Widerspruch zu erklären?




Lösung

Übung 6-3: Lösungen der Fickschen Gesetze

 Gegebene Lösung nehmen, in Differentialgleichung einsetzen, sehen was daraus folgt.

Übung 6.2-4: Gitterfaktoren

 Berechne den [Geometriefaktor](#) g für die (Leerstellen) Diffusion mit der [gegebenen Formel](#) für

- ☐ Einen einatomigen **fcc** Kristall
- ☐ Einen einatomigen **bcc** Kristall
- ☐ Einen Kristall vom [Diamant Typ](#)



Lösung

Übung 6.3-1: Umgang mit Fakultäten und der Stirlingformel

Wir haben [die Formeln](#):

- Absolute Wahrscheinlichkeit $w_N(x)$ mit N digitalen (nur $+1$ und -1) Würfeln die Zahl x zu würfeln (x kann positiv *und* negativ, gerade *oder* ungerade sein).

$$w_N(x) = 0,5 \cdot \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N+x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N-x)\}!}$$

- [Die Stirlingformel](#)

$$\ln y! \approx (y + 1/2) \cdot \ln y - y + \ln (2\pi)^{1/2}$$

Was ergibt sich für $w_N(x)$ wenn man mit der Stirlingschen Formel die Fakultäten nähert?

- Dabei kann auch noch die physikalische Näherung $x/N \ll 1$ verwendet werden, um (über eine geeignete Reihenentwicklung) die Ausdrücke zu vereinfachen.

Was ergibt sich, falls man die einfacheren Versionen der Stirlingformel verwendet? Darf man das - falls nicht, was sind die Kriterien?

Dies ist eine unerwartet schwierige Aufgabe mit diversen Überraschungen. Es lohnt sich, zumindest die Lösung anzuschauen.



Lösung

Lösungen zur Übung 6-1

Wir nehmen die [Lösung](#) ebenfalls aus dem "Defects" Hyperscript.

Illustration

Lösungen zur Übung 6.2-2

Illustration

- ▶ Kommt sowas vor? Gibt es einen konstanter Strom durch einen Körper, ohne dass sich die Konzentration der strömenden Teilchen im Körper ändert?

 - Aber ja - zum Beispiel immer dann, wenn ein **elektrischer** Strom durch einen ohmschen Widerstand fließt. Was dabei fließt sind natürlich Teilchen - Elektronen - und die treibende Kraft ist auch nicht ein Konzentrationsgradient, sondern ein elektrisches Feld, aber die Problematik ist dieselbe.
 - Warum gibt es am positiven Pol keinen Elektronstau, d.h. eine ständig wachsende Konzentration, obwohl pro Sekunde eine konstante Zahl an Elektronen dort eintrifft? Oder eine entsprechend abnehmende Konzentration am Minuspol?
 - Weil die am Pluspol ankommenden Elektronen sofort "beseitigt" werden, und (per Spannungsquelle) am Minuspol wieder eingespeist werden.
 - Falls wir nur das Teilsystem "Widerstand", und nicht das Gesamtsystem "geschlossener Stromkreislauf incl. Spannungsquelle" betrachten, müssen wir eine Elektronenquelle am Minuspol, und eine Elektronensenke am Pluspol postulieren, damit unsere Konstantstrombedingung erfüllbar ist.
- ▶ Auf unser Problem übertragen heißt das ganz einfach: Wir können Probleme dieser Art nur zusammen mit den Randbedingungen formulieren!

 - Ein Konzentrationsprofil der gezeigten Art kann nur existieren, wenn als Randbedingung festgelegt wird, dass $c(x = 0) = c_0 = \text{const}(t)$ und $c(x = x_0) = 0$.
 - Das ist aber nur die mathematische Formulierung der Bedingung, dass geeignete **Quellen** und **Senken** für die diffundierenden Teilchen vorhanden sein müssen.
- ▶ Wir müssen also zulassen, dass Teilchen aus dem (mathematischen) "Nichts" entstehen und in das "Nichts" verschwinden.

 - Bei der Herleitung des 2. Fickschen Gesetzes haben wir aber die Teilchenzahl konstant gehalten, d.h. Erzeugung und Vernichtung ausgeschlossen. Das ist für die betrachteten Beispiele auch weiterhin **physikalisch** richtig für das **gesamte** System, aber eben nicht mehr für nur einen Teil des Systems.
 - Dort wo wir das System "aufgeschnitten" haben - also an den Rändern - müssen wir dann entsprechende Quellen- und Senkenterme sowie Anfangsbedingungen einführen.

Lösungen zur Übung 6-3

Illustration



Lösungen zur Übung 6.2-4

Illustration

Der Geometriefaktor war für eine einzelne Leerstelle wie folgt definiert:

$$g = \frac{1}{2} \cdot \sum_i \left(\frac{\Delta x_i}{a} \right)^2$$

- Mit Δx_i = Komponente des Sprungs in die x -Richtung.

Bei Betrachtung des [fcc Gitters](#) wird klar, daß es **12** Möglichkeiten für einen Sprung gibt, da es immer **12** nächste Nachbarn gibt.

- Nur **8** der möglichen Sprünge haben aber eine Komponente in x (oder $-x$) -Richtung, und es gilt $\Delta x_i = a/2$
- Damit haben wir

$$g_{\text{fcc}} = \frac{1}{2} \cdot 8 \cdot \frac{1}{2}^2 = 1$$

Bei Betrachtung des [bcc Gitters](#) ergeben sich **8** Möglichkeiten für einen Sprung, da wir **8** nächste Nachbarn haben.

- Alle der **8** möglichen Sprünge haben die Komponente $\Delta x_i = a/2$ in x - Richtung; wir haben damit

$$g_{\text{bcc}} = \frac{1}{2} \cdot 8 \cdot \frac{1}{2}^2 = 1$$

Bei der [Diamant Struktur](#) müssen wir etwas schärfer nachdenken, aber es ergeben sich letztlich **4** Sprungmöglichkeiten.

- Alle **4** Sprünge haben die Komponente $\Delta x_i = a/4$ in x - Richtung und wir erhalten

$$g_{\text{diamond}} = \frac{1}{2} \cdot 4 \cdot \frac{1}{4}^2 = 1/8$$

Lösungen zur Übung 6.3-1

Illustration

Wir haben die Formeln:

- Absolute Wahrscheinlichkeit $w_N(x)$ mit N digitalen (nur $+1$ und -1) Würfeln die Zahl x zu würfeln (x kann positiv *und* negativ sein).

$$w_N(x) = 0,5 \cdot \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N+x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N-x)\}!}$$

- [Die Stirlingformel](#)

$$\ln y! \approx (y + 1/2) \cdot \ln y - y + \ln(2\pi)^{1/2}$$

Was ergibt sich für $w_N(x)$ wenn man mit der Stirlingschen Formel die Fakultäten nähert?

- Dabei kann auch noch die physikalische Näherung $x/N \ll 1$ verwendet werden, um (über eine geeignete Reihenentwicklung) die Ausdrücke zu vereinfachen.

Vorbemerkung: So wie diese Aufgabe jahrelang in Hyperskript stand, kam am Ende ein [falsches Ergebnis](#) heraus. Das lag nicht daran, dass ich hier falsch gerechnet habe, sondern.... (*weiter unten selber gucken*)

Wir ignorieren zunächst den roten Faktor **0,5**; er stammt aus etwas tieferen Überlegungen bei der Ableitungen der Wahrscheinlichkeit. Wir können ihn später einfach wieder einsetzen

- Die Ausgangsgleichungen sind dann

$$w_N(x) = \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N+x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N-x)\}!}$$

$$\ln y! \approx (y + 1/2) \cdot \ln y - N + \ln(2\pi)^{1/2}$$

- Schreibt man die 1. Gleichung mit Hilfe der Stirlingschen Formel aus, erhält man

$$\begin{aligned} \ln w &= (N + 1/2) \cdot \ln N - N + \ln(2\pi)^{1/2} \\ &- \left\{ \left[\left(\frac{1}{2}(N+x) + \frac{1}{2} \right) \cdot \ln \left[\frac{1}{2}(N+x) \right] - \left[\frac{1}{2}(N+x) \right] + \ln(2\pi)^{1/2} \right\} \\ &- \left\{ \left[\left(\frac{1}{2}(N-x) + \frac{1}{2} \right) \cdot \ln \left[\frac{1}{2}(N-x) \right] - \left[\frac{1}{2}(N-x) \right] + \ln(2\pi)^{1/2} \right\} \\ &- N \cdot \ln 2 \end{aligned}$$

- Die roten und blauen Terme addieren sich zu Null, es bleibt

$$\begin{aligned} \ln w &= \left\{ (N + 1/2) \cdot \ln N - \ln(2\pi)^{1/2} - N \cdot \ln 2 \right\} \\ &- \left\{ \left[\left(\frac{1}{2}(N+x) + \frac{1}{2} \right) \cdot \ln \left[\frac{1}{2}(N+x) \right] \right\} \\ &- \left\{ \left[\left(\frac{1}{2}(N-x) + \frac{1}{2} \right) \cdot \ln \left[\frac{1}{2}(N-x) \right] \right\} \end{aligned}$$

- Der rote Zeile lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \{ \} &= N \cdot \ln N + \frac{1}{2} \cdot \ln N - \ln (2\pi)^{1/2} - N \cdot \ln 2 \\ &= N \cdot \ln (N/2) + \ln (N/2)^{1/2} \end{aligned}$$

- und den blauen Term schreiben wir als

$$N \cdot \ln (N/2) = \frac{1}{2}(N+x+1) \cdot \ln (N/2) + \frac{1}{2}(N-x+1) \cdot \ln (N/2) - \ln (N/2)$$

- Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \ln w &= \ln (N/2\pi)^{1/2} - \ln (N/2) \\ &+ \frac{1}{2}(N+x+1) \cdot \ln (N/2) \\ &+ \frac{1}{2}(N-x+1) \cdot \ln (N/2) \\ &- \left\{ \frac{1}{2}(N+x+1) \cdot \ln [\frac{1}{2}(N+x)] \right\} \\ &- \left\{ \frac{1}{2}(N-x+1) \cdot \ln [\frac{1}{2}(N-x)] \right\} \end{aligned}$$

- oder, zusammengefaßt

$$\begin{aligned} \ln w &= \ln (N/2\pi)^{1/2} - \ln (N/2) \\ &+ \frac{1}{2}(N+x+1) \cdot \{ \ln (N/2) - \ln [\frac{1}{2}(N+x)] \} \\ &+ \frac{1}{2}(N-x+1) \cdot \{ \ln (N/2) - \ln [\frac{1}{2}(N-x)] \} \end{aligned}$$

- Die erste Zeile läßt sich zusammenfassen zu

$$\ln (N/2\pi)^{1/2} - \ln (N/2) = \ln (N/2\pi)^{1/2} - \ln [(N/2)^2]^{1/2} = \ln (2/N\pi)^{1/2}$$

- Die \ln Ausdrücke in der 2. und 3. Zeile lassen sich zusammenfassen zu

$$\begin{aligned} \{ \ln (N/2) - \ln [\frac{1}{2}(N+x)] \} &= \ln \frac{N \cdot 2}{2 \cdot (N+x)} = \ln \frac{N}{N+x} = -\ln (1+x/N) \\ \{ \ln (N/2) - \ln [\frac{1}{2}(N-x)] \} &= \ln \frac{N \cdot 2}{2 \cdot (N-x)} = \ln \frac{N}{N-x} = -\ln (1-x/N) \end{aligned}$$

- Damit haben wir

$$\begin{aligned} \ln w &= \ln (2/N\pi)^{1/2} \\ &- \frac{1}{2}(N+x+1) \cdot \ln (1+x/N) \\ &- \frac{1}{2}(N-x+1) \cdot \ln (1-x/N) \end{aligned}$$

Weiter kommt man nicht, jetzt muß *genähert* werden

- N war die Zahl der digitalen Würfel, die nur $+1$ oder -1 als Augenzahl haben, x war die Summe der Augen, d.h. die gewürfelte Zahl zwischen $-N$ und $+N$.

- Da wir immer nur Systeme mit sehr großen N betrachten, ist es ziemlich unwahrscheinlich, Ergebnisse in der Nähe von $-N$ und $+N$ zu bekommen; wir können immer $x \ll N$ annehmen.
- Damit wird aus den \ln Ausdrücken der beiden letzten Zeilen näherungsweise

$$\begin{aligned}\ln(1 + x/N) &\approx +x/N \\ \ln(1 - x/N) &\approx -x/N\end{aligned}$$

- und wir erhalten

$$\begin{aligned}\ln w &\approx \ln (2/N\pi)^{1/2} \\ &\quad - \frac{1}{2}(N + x + 1) \cdot (x/N) \\ &\quad + \frac{1}{2}(N - x + 1) \cdot (x/N) \\ &\approx \ln (2/N\pi)^{1/2} - x^2/N\end{aligned}$$

Damit ist das Endergebnis

$$w_N(x) = \left(\frac{2}{\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{N}$$

Eine zwar etwas mühevollen, aber doch nicht wirklich schwierige Rechnung.

- Wenn wir den Faktor **0,5** von oben jetzt dazunehmen, erhalten wir

$$w_N(x) = 0,5 \cdot \left(\frac{2}{\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{N} = \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{N}$$

Alles ist richtig. Gehen wir aber zurück zum Ausgangsmodell und setzen das Ergebnis ein, erhalten wir *nicht* die eigentlich erhoffte Gauss Verteilung w_{Gauss} sondern $(2)^{1/2} \cdot w_{\text{Gauss}}$. Viele Jahre lang war nicht klar, wo genau etwas schief ging. Die Lösung des Rätsels verdanke ich **Dr. Felix Scheliga** aus Hamburg:

Der "Fehler" steckt in der Näherung $\ln(1 + x/N) \approx x/N$. Sie reicht nicht aus. Man muss zumindest das zweite Glied noch mitnehmen: $\ln(1 \pm x/N) \approx x/N \mp \frac{1}{2}(x^2/N^2)$.

- Startet man damit in obiger Formel, sieht der Rechengang so aus:

$$\begin{aligned}
 & \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{N+x+1}{2}\right) \cdot \left(\ln\left[1 + \frac{x}{N}\right]\right) - \left(\frac{N-x+1}{2}\right) \cdot \left(\ln\left[1 - \frac{x}{N}\right]\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{N+x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{x}{N} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x^2}{N^2}\right) - \left(\frac{N-x+1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{x}{N} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x^2}{N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{N+x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot N \cdot x}{2 \cdot N^2} - \frac{x^2}{2 \cdot N^2}\right) - \left(\frac{N-x+1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{2 \cdot N \cdot x}{2 \cdot N^2} - \frac{x^2}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{N+x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot N \cdot x - x^2}{2 \cdot N^2}\right) + \left(\frac{N-x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot N \cdot x + x^2}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] + \left(\frac{N-x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot N \cdot x + x^2}{2 \cdot N^2}\right) - \left(\frac{N+x+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot N \cdot x - x^2}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] + \left(\frac{2 \cdot N^2 \cdot x + N \cdot x^2 - 2 \cdot x^2 \cdot N - x^3 + 2 \cdot N \cdot x + x^2}{4 \cdot N^2}\right) - \\
 &\quad \left(\frac{2 \cdot N^2 \cdot x - N \cdot x^2 + 2 \cdot N \cdot x^2 - x^3 + 2 \cdot N \cdot x - x^2}{4 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] + \left(\frac{2 \cdot N^2 \cdot x + N \cdot x^2 - 2 \cdot x^2 \cdot N - x^3 + 2 \cdot N \cdot x + x^2 - 2 \cdot N^2 \cdot x + N \cdot x^2 - 2 \cdot N \cdot x^2 + x^3 - 2 \cdot N \cdot x + x^2}{4 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] + \left(\frac{x^2 - x^2 \cdot N}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] + \left(\frac{x^2 \cdot (1 - N)}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{x^2 \cdot (N - 1)}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{x^2 \cdot N}{2 \cdot N^2}\right) \\
 &= \ln\left[\left(\frac{2}{\pi \cdot N}\right)^{\frac{1}{2}}\right] - \left(\frac{x^2}{2 \cdot N}\right)
 \end{aligned}$$

● Damit erhält man ein Ergebnis, das beim Einsetzen in die Ursprungsaufgabe die Gauss Verteilung liefert.

$$w_N(x) = 0,5 \cdot \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} = \left(\frac{1}{2N\pi}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$$

Aber:

● Wir *starteten* mit einer *diskreten* Funktion $w_N(x)$, die nur unter folgenden Bedingungen sinnvolle Werte lieferte:

- x, N beide ganzzahlig
- $N > x > -N; N > 0$
- x, N beide gerade oder beide ungerade.

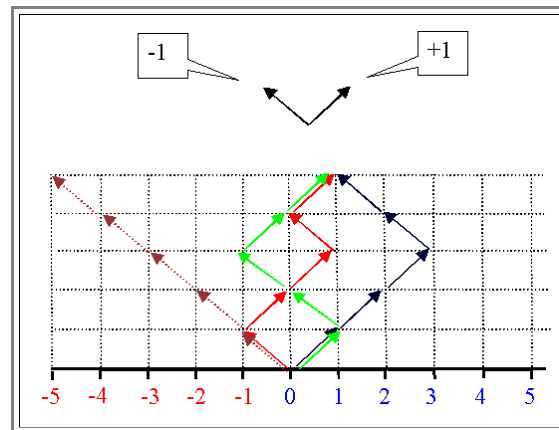
● *Erhalten* haben wir eine *analytische* Funktion die für *jedes* positive N und jedes (positive oder negative) x einen reellen Wert liefert - ob er sinnvoll ist bleibt noch abzuwarten!

● Hier steckt wohl ein Problem. Die diversen Feinheiten der Interpretation sind aber im [advanced Modul](#) genauer dargestellt.

Würfelwege zum Ziel

Illustration

- Bei der Frage, mit wievielen **unterscheidbaren Möglichkeiten** man mit einem digitalen Würfel (z.B. eine Münze: Kopf = $+1$, Zahl = -1) und n Würfeln eine Zahl x zwischen $+N$ und $-N$ würfeln kann, ist es hilfreich, sich die Wege zum Ziel graphisch darzustellen. Ein Beispiel:



- Viele Wege führen zum Ziel $+1$ (3 sind eingezeichnet), nur einer führt zum Ziel -5 . Die Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Zahl zu würfeln, ist natürlich direkt proportional zur Zahl der Wege zum Ziel.
- Nur Wege, die in diesem Diagramm unterscheidbar sind, sind **unterscheidbare Anordnungen**!

1. Hauptsatz der Betriebswirtschaftslehre

Der erste Hauptsatz der Betriebswirtschaftslehre lautet:



Illustration

Es gibt nichts umsonst.

- Wer also nicht mehr Kombinatorik treiben will, muß andere geistige Klimmzüge machen.

Das ist natürlich nur der erste Hauptsatz der Thermodynamik in Verkleidung. Andere, mehr *wirtschaftlich* orientierte Formulierungen der thermodynamischen Hauptsätze sind:

- You can't win. (1. Hauptsatz).
- You can't even break even. (2. Hauptsatz).
- You can't quit trying. (3. Hauptsatz; Unerreichbarkeit des absoluten Nullpunkts).

Einige Zahlen für Fremdatomdiffusion

Illustration

Diffundierendes Atom	Wirtskristall	Diffusionsmechanismus	Wanderungsenergie (eV)	Vorfaktor D_0 (cm/s)
C	Fe	interstitiell	1,25	0,008
N	Fe	interstitiell	0,78	0,007
H	Fe	interstitiell	0,43	0,01
Ni	Fe	substitutionell	2,86	0,5
Co	Fe	substitutionell	2,34	0,2
Si	Fe	substitutionell	2,08	0,4
Al	Cu	substitutionell	1,69	0,07
S	GaAs	substitutionell	4,0	4000
Zn	GaAs	substitutionell	2,47	$1,5 \cdot 10^{-8}$
P	Si	substitutionell		
As	Si	substitutionell		
B	Si	substitutionell		
(aus "Barett")				

Einige Zahlen für Selbstdiffusion

Kristall	Diffundierendes Atom	Schmelztemperatur °C	Aktivierungsenergie (= $E_{M,V} + E_{F,V}$)
H ₂	H ₂	- 259	0,016
Ar	Ar	- 189	0,18
H ₂ O	H ₂ O	0	0,58
NaCl	Cl	801	2,3
NaCl	Na	801	0,86
Ge	Ge	940	2,94
Si	Si	1412	5,11 (sub + interstit.)
GaAs	Ga	1238	5,54
GaAs	As	1238	9,96
Al	Al	660	1,47
Cu	Cu	1083	2,03
Ni	Ni	1455	2,86

Vektoren und Tensoren

■ Dieser Modul kann kurz sein. Denn beide Themen, *Vektoren* und *Tensoren* sind bereits anderswo behandelt.

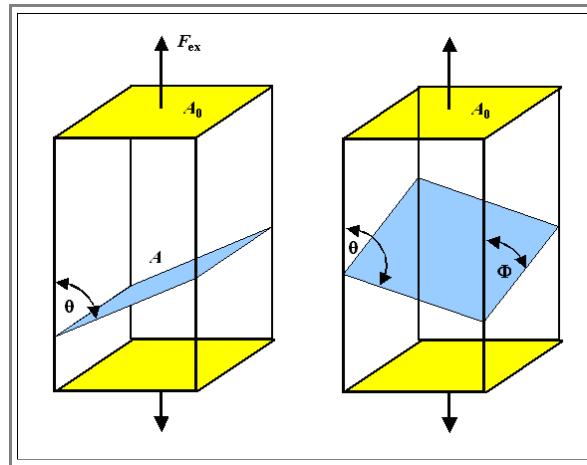
- Einiges zu *Vektoren* finden wir in einem ["Basis"-Modul in Kapitel 3](#) dieses Hyperskripts
- *Tensoren* sind (in Englisch) in einem anderen Hyperskript ["Basic"-module](#) im Hyperscript "Defects" abgehandelt.

Spannungszustände und Konsequenzen für eine allgemeine Ebene

Advanced

Im Hauptteil haben wir die Spannungen in einer *beliebig* orientierten Ebene berechnet, wobei sich das *beliebig* aber nur auf den *einen* Winkel relativ zu einer der beiden möglichen, senkrecht zur Zugrichtung stehenden Achsen bezog.

Die Situation ist im Bild links noch einmal dargestellt, der Winkel θ beschreibt die Geometrie vollständig.



Rechts ist der jetzt wirklich allgemeinste Fall einer beliebig orientierten Ebene. Wir brauchen einen zweiten Winkel ϕ um die Lage der Ebene zu charakterisieren.

- Wie groß ist jetzt die Normal- und Scherspannung in dieser Ebene?
- Das ist immer noch ziemlich elementare Geometrie; die wir im Detail weder nachvollziehen müssen noch wollen. Das Ergebnis ist nämlich nicht sonderlich interessant.

Interessant ist nämlich nur die in der betrachteten Ebene *in Richtung der Gleitrichtung* wirkende Schubspannung.

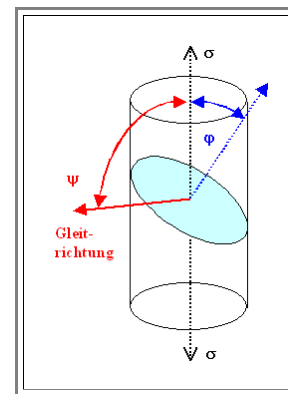
Die *Gleitrichtung* ist die Richtung in der die Ebenen aufeinander abgleiten (wie vielleicht am klarsten in einem [Bild in Kap. 8](#) dargestellt). Letztlich interessiert *nur* die Spannung in dieser Richtung.

Die gesuchte Formel wird am einfachsten, wenn man die beiden die Ebene charakterisierende Winkel anders definiert. Wir nehmen, wie nebenstehend dargestellt:

- φ = Winkel zwischen Ebenennormale und Zugrichtung
- ψ = Winkel zwischen Zugrichtung und Gleitrichtung

Das beschert uns die extrem simple Formel für die Schubspannung τ in Gleitrichtung

$$\tau = \sigma \cdot \cos \varphi \cdot \cos \psi$$



Diese Gleichung ist auch als **Schmidsches Schubspannungsgesetz** bekannt, $\cos \varphi \cdot \cos \psi$ ist der **Schmidfaktor** des betrachteten [Gleitsystems](#).

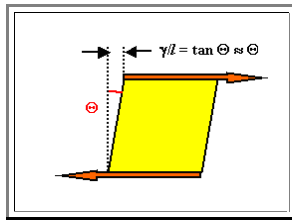
Simplel, aber nicht ganz ohne. Was ist der maximale Schmidfaktor eines gegebenen Kristalls? Mache ich $\varphi = 0$, habe ich zwar den größtmöglichen $\cos \varphi$; aber gleichzeitig wird unweigerlich $\cos \psi = 0$.

- Letztlich wird man bei $\varphi = 45^\circ$ landen, wie gehabt, und eine Gleitrichtung in der großen Achse der Ellipse im nebenstehenden Bild.
- Wie auch immer: Sobald die mit dem Schmidfaktor berechnete Schubspannung auf irgendeiner Gleitebene in einer der möglichen Gleitrichtungen den kritischen Wert erreicht, beginnt Versetzungsbewegung und damit plastische Verformung.

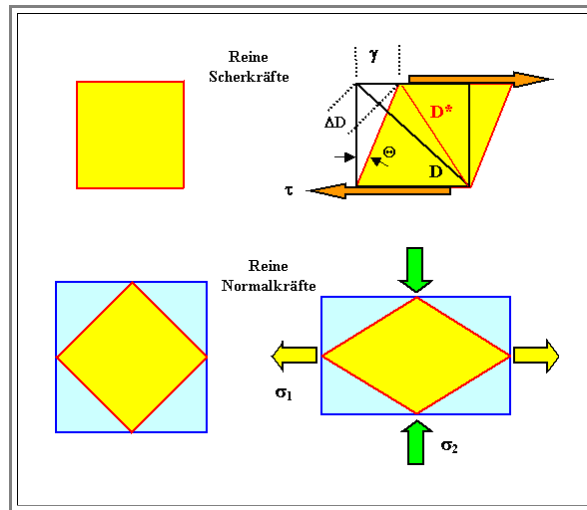
Beziehung zwischen E-Modul und Schermodul

Advanced

- Wie kann man die durch reine Scherspannung erzeugte Verformung durch reine Normalspannungen erhalten? Falls wir einen Weg finden, bekommen wir automatisch eine Beziehung zwischen Schermodul G und Elastizitätsmodul E .



- Die Ausgangslage ist links gezeigt. Die reine Scherspannung verformt ein Quadrat in ein Raute.
- Wir können exakt die gleiche Verformung auch anders erhalten. Dazu betten wir *gedanklich* unser Quadrat (oder dreidimensional unseren Würfel) in ein identisches Material ein wie unten gezeigt.



- Oben die Verformung mit reinen Scherkräften, unten exakt die gleiche Verformung mit reinen Normalkräften - nach Drehung um 45° und "Einbettung".

- Das klappt offenbar - wir erhalten dieselbe Verformung. Nun wollen wir damit den Schermodul berechnen.

- Der Schermodul war definiert als $G = \tau / \Theta$.

- Wir können das auch über die Änderung der Diagonalen $\Delta D = D - D^*$ ausdrücken, da $\gamma^2 = 2 \Delta D^2$, gilt $\gamma = 2^{1/2} \cdot \Delta D$.
- Damit kann man Θ wie folgt ausdrücken:

$$\Theta = \frac{\gamma}{l} = \frac{2^{1/2} \cdot \Delta D}{D} = \frac{2 \cdot \Delta D}{D}$$

- l ist die Länge des inneren Würfels; für kleine Winkel (die wir hier immer voraussetzen) gilt $l \approx 2^{1/2} D$.

- Was bekommen wir mit den Normalspannungen σ ?

- Die erste Verformung mit nur σ_1 gibt eine Längenänderung der Diagonalen (Querkontraktion bei der zweiten Diagonalen beachten)

$$\frac{\Delta^{(1)}D_1}{D_1} = \epsilon^{(1)}_1 = \frac{\sigma_1}{E}$$

$$\frac{\Delta^{(1)}D_2}{D_2} = \epsilon^{(1)}_2 = -\nu \cdot \epsilon^{(1)}_1 = -\nu \cdot \frac{\sigma_1}{E}$$

Wird jetzt die zweite Verformung mit σ_2 überlagert, erhalten wir den zweiten Satz and Dehnungen.

$$\frac{\Delta^{(2)}D_2}{D_2} = \epsilon^{(2)}_2 = \frac{\sigma_2}{E}$$

$$\frac{\Delta^{(2)}D_1}{D_1} = -\nu \cdot \epsilon^{(2)}_2 = +\nu \cdot \frac{\sigma_2}{E}$$

Solange die Dehnungen klein sind, dürfen wir sie linear überlagern, und erhalten

$$\frac{\Delta D_1}{D_1} = \frac{\Delta^{(1)}D_1 + \Delta^{(2)}D_1}{D_1} = \frac{\sigma_1 + \nu \cdot \sigma_2}{E}$$

$$\frac{\Delta D_2}{D_2} = \frac{\Delta^{(1)}D_2 + \Delta^{(2)}D_2}{D_2} = \frac{\sigma_2 + \nu \cdot \sigma_1}{E}$$

Da die beiden Diagonalen entgegengesetzt gleichgroße Längenänderungen erfahren müssen, erhalten wir als erstes Resultat $|\sigma_1| = |\sigma_2|$.

- Die Scherkräfte auf die Flächen des gelben Quadrats bzw Würfels sind damit

$$F_T = \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 2^{-1/2} \sigma \cdot A_{\text{blau}} = 2^{-1/2} \sigma \cdot A_{\text{blau}}$$

- da jede der jeweils 2 wirkenden Kräfte eine Komponente $2^{-1/2}$ in der gelben Ebene hat und dort *zur Hälfte* wirkt; A_{blau} ist die Fläche des blauen Würfels.
- Die Fläche des gelben Würfels ist $A_{\text{gelb}} = 2^{-1/2} \cdot A_{\text{blau}}$, damit erhalten wir für die Scherspannungen

$$\tau = \frac{F_t}{A_{\text{gelb}}} = \sigma$$

Einsetzen von $\sigma = \tau$ in die $\Delta D/D$ Formel und [umschreiben](#) auf Θ ergibt

$$\frac{\Delta D}{D} = \frac{\sigma(1+\nu)}{E} = \frac{\tau(1+\nu)}{E} = \frac{\Theta}{2}$$

Als Endergebnis erhalten wir

$$\tau = \frac{E}{2 \cdot (1 + \nu)} \cdot \Theta$$

Das ist die im [Skript gegebene Formel](#), falls wir den Schermodul G definieren als

$$G = \frac{E}{2 \cdot (1 + \nu)}$$

Diese Umrechnung ist natürlich nur eine Art indirekte Hauptachsentransformation. Eine Rotation des Koordinatensystems um 45° hätte genau die richtige Spannungsverteilung gezeigt; siehe den [entsprechenden Modul](#).

Maximum der Spannungs - Dehnungskurve,

"wahre" Spannungen und Dehnungen und

Instabilität durch Einschnürung

Maximum der Spannungs - Dehnungskurve und "wahre" Spannungen

Advanced

Wieso hat die in Kapitel 7.1.1. [gezeigte Spannungs- Dehnungskurve](#) ein Maximum (und die in Kapitel 8.2.1 [gezeigten](#) nicht?). Die Antwort ist einfach:

- Weil der Querschnitt der Probe immer kleiner wird, wir aber die Spannung σ in Kapitel 7 immer auf den *Ausgangsquerschnitt* bezogen haben.
- Die "**wahre**" Spannung σ^* (sie heißt wirklich so!) ist bei verringertem Querschnitt natürlich höher, es gilt

$$\sigma^* = \frac{\sigma}{A^*}$$

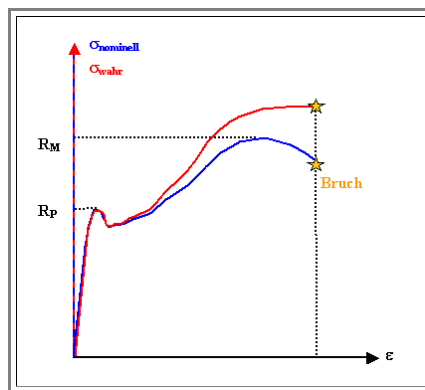
$$A^* = \text{"wahrer" Querschnitt} = \frac{A}{\epsilon + 1}$$

- (Folgt aus $A^* \cdot l = A \cdot l_0$ wg. Volumenkonstanz)

Man kann also leicht von den **nominellen Spannungen**, die immer auf den Ausgangsquerschnitt bezogen sind (engl."engineering strain") auf die *wahre Spannung* beim Zugversuch umrechnen.

- Das ist natürlich nur bei großen Verformungen von Einfluß. Solange wir im *elastischen* Bereich bleiben, lohnt es sich nicht. Bei *plastischer* Verformung ist es aber wichtig, sich darüber im klaren zu sein, daß die Probe *nur* die wahren Spannungen spürt und nicht die nominellen.

Trägt man die Spannungs - Dehnungskurve für die *wahren* Spannungen auf, *verschwindet das Maximum*! Das haben wir für die Einkristallverformung gemacht, denn für diese grundsätzliche Betrachtung ist die wahre Spannung, die Spannung am Ort der Versetzungen, wichtig.



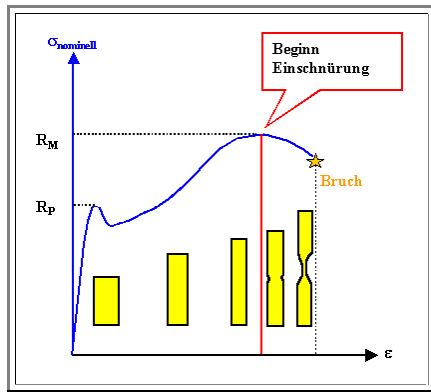
Mit den wahren Spannungen sind die Dinge zwar klarer - man kann ein Stück Kristall nicht wirklich länger ziehen, indem man die am Ort der Versetzungen wirklich wirkende Spannung *reduziert* - aber oft auch unpraktischer!

- Das Maximum der Verformungskurve, und damit die maximale Zugfestigkeit R_M als Materialparameter sind *nicht mehr definiert* oder zumindest nicht mehr leicht aus der Kurve zu entnehmen.
- Das ist schlecht, denn R_M hat eine weitere wichtige Bedeutung, die wir kurz streifen werden

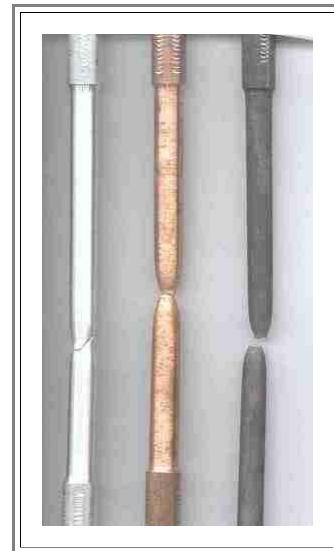
Instabilität durch Einschnürung

Sobald das Maximum der nominellen Spannung in der Spannungs - Dehnungskurve erreicht ist, beginnt die Probe sich **einzuschnüren**.

Das sieht schematisch so aus:

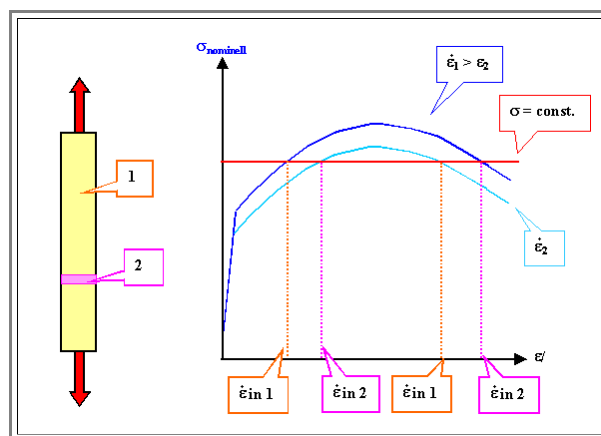


Und in der Realität so:



Was hat das Maximum der Spannungs - Dehnungskurve und der Beginn der Einschnürung miteinander zu tun?

- Die Antwort liegt in der Abhängigkeit der Spannungs - Dehnungskurve von der **Dehnungsgeschwindigkeit** $d\epsilon/dt$. Obwohl diese Abhängigkeit gering sein kann, wird man doch im allgemeinen höhere Spannungen brauchen um dieselbe Dehnung bei höherer Dehnungsgeschwindigkeit zu erreichen; [Beispiele](#) sind im Link zu finden
- Betrachten wir eine Zugprobe, bei der ein kleiner Bereich **2** anfänglich eine größere Dehnung hat als der restliche Bereich **1** - irgendeine kleine Inhomogenität, was auch immer. Die Frage ist: Wie reagiert der Kristall? Wird Bereich **2** gebremst oder noch beschleunigt?
- Zur Antwort schauen wir auf das schematische Bild unten, das zwei Spannungs - Dehnungskurven bei verschiedenen Dehnungsgeschwindigkeiten zeigt; wichtig ist dabei nur, daß die schnellere Dehnungsgeschwindigkeit immer mehr Spannung braucht als die langsamere.



Da die Spannung immer überall gleich ist, liegt Bereich **2** links vom Maximum auf der unteren Kurve, rechts vom Maximum auf der oberen Kurve mit der höheren Dehnungsgeschwindigkeit.

- Bereich **1** liegt links vom Maximum auf der oberen Kurve, dehnt sich also schneller und wird Bereich **2** schnell einholen. Rechts vom Maximum wird Bereich **2** jedoch "davonlaufen" und sich immer schneller dehnen.
- Dadurch wird die Probe im Bereich **2** dünner als im restlichen Bereich **1** - Einschnürung erfolgt, und die nominelle Spannung kann zurückgehen, da die lokalen Spannungen im Bereich **2** trotzdem groß bleiben. Die Probe wird sich lokal immer schneller dehnen (wobei die gesamte mittlere Dehnungsgeschwindigkeit trotzdem konstant bleibt) und schließlich brechen.

Die maximale Zugfestigkeit (manchmal auch **obere Streckgrenze** genannt) hat also eine signifikante und wichtige Bedeutung und es ist durchaus praktisch Spannungs - Dehnungsdiagramme mit den nominellen und nicht mit den wahren Spannungen zu messen.

"Wahre" Dehnungen

Genauso wie die nominellen Spannung nur dann mit den wirklich im Material vorhandenen Spannungen annähernd identisch sind falls sich der Querschnitt nicht nennenswert ändert, die Verformungen also klein sind, sind **große Dehnungen** ϵ ebenfalls fragwürdig:

- Denn Gesamtdehnungen können mit der nominellen Definition von ϵ genauso wenig durch Addition von einzelnen Dehnungen ermittelt werden, wie ein Gesamtzins aus der Addition von Einzelzinsen.
- In anderen Worten: Ein mit **10 %** (pro Jahr) verzinstes Guthaben von **€100** ist nach **5** Jahren eben **nicht** auf in Summe **€100 + 50% = €150** angestiegen, sondern auf **€(100 + 10 + 11 + 12 + 13 + 14) = €160**.
Man nennt das **Zinseszinsrechnung**

Mit der bisher benutzten **nominellen Dehnung** ϵ ist es offenkundig genauso.

- Für **kleine** Dehnungen (wie für kleine Zinssätze) ist der Fehler den man durch Aufaddieren der Dehnungen macht nicht groß und man braucht sich keine Gedanken über mögliche Konsequenzen zu machen.
- Für **große** Dehnungen jedoch, wie sie bei der plastischen Verformung oder bei Elastomeren (dem Gummi) auftreten können, wird die Sache kritisch. Die insgesamt für eine Verformung bis zu einem (großen) ϵ_1 aufzuwendende Arbeit P_1 kann und darf nicht vom Weg abhängen, sie ist immer .

$$P_1 = \int_{l_0}^l F \cdot dl'$$

- Mit $F = \sigma^* \cdot A$, $l = l_0(\epsilon + 1)$, $dl = l_0 \cdot d\epsilon$ (A ist die (**aktuelle**) Querschnittsfläche) erhalten wir

$$P_1 = A \cdot l_0 \cdot \int_0^{\epsilon_1} \sigma^* \cdot d\epsilon$$

- Damit wird die **spezifische** Arbeit P^1_{spez} pro Volumen $V (= A \cdot l_0)$

$$P^1_{\text{spez}} = \frac{P_1}{V} = \int_0^{\epsilon_1} \sigma^* \cdot d\epsilon$$

Die insgesamt geleistete Arbeit kann und darf aber nicht davon abhängen, ob wir "in einem Rutsch" bis ϵ_1 verformen, oder erst bis zu einem beliebigen Wert ϵ' , und in einem zweiten Anlauf von ϵ' bis ϵ_1 . Wir müssen also fordern

$$P^1_{\text{spez}} = \int_0^{\epsilon_1} \sigma d\epsilon = \int_0^{\epsilon'} \sigma d\epsilon + \int_{\epsilon'}^{\epsilon_1} \sigma d\epsilon$$

- Diese Forderung ist bei nominellen Dehnungen **nicht erfüllt** - man vergleiche die Aufteilung in Einzelsummen (= Integrale) bei der obigen Zinseszinsrechnung.

Wir brauchen also eine **Neudefinition** der Dehnung, die auch für große Dehnungen additiv ist.

- Dazu starten wir einfach mit einer inkrementell kleine Dehnung $d\epsilon$; die gesamte Dehnung erhalten wir dann durch Aufintegration - wie beim Zinseszins, nur daß wir kleine Inkremente (nicht nur "Jahresscheiben") betrachten
- Aus

$$\epsilon = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0}$$

- wird dann

$$d\epsilon = \frac{dI}{I}$$

● und es ist wichtig, daß wir jetzt **dI** auf die real vorliegende Länge und nicht mehr auf **I₀** beziehen.

▮ Damit wird die **wahre Dehnung** ϵ^* - man nennt es wirklich so:

$$\epsilon^* = \int_{I_0}^I d\epsilon = \int_{I_0}^I \frac{dI}{I} = \ln \frac{I}{I_0}$$

▮ Das ist im Prinzip eine bessere Definition der Dehnung als die nominellen Dehnungen - aber wer mag schon mit Logarithmen rechnen wenn es nicht unbedingt sein muß?.

● Was man fast automatisch tut, ist den **ln** - Ausdruck in eine Reihe zu entwickeln. Und dann erhalten wir für **kleine** ΔI die nominellen Dehnungen, wie es auch sein sollte:

$$\epsilon^* = \ln \frac{I}{I_0} = \ln \frac{I_0 + \Delta I}{I_0} = \ln \left(1 + \frac{\Delta I}{I_0} \right) \approx \frac{\Delta I}{I_0} \approx \epsilon$$


Mehr über den Sprödbbruch

■ Nachfolgend 2 links die mehr über dne Sprödbbruch enthaltne . allerdings in Englisch:

- [A Few Basics about Fracture](#)
- [Fracture Mechanics I](#) Energetische Betrachtung zur Rissausbreitung.
- [Fracture Mechanics II](#)

Advanced

Übung 7.1-1: Querkontraktionszahl

 Berechne die Querkontraktionszahl ν für eine Zugverformung ohne Volumenänderung



Lösung

Übung 7.1-2

Beziehung zwischen E und K

Wir leiten die Beziehung zwischen dem Elastizitätsmodul E und dem Kompressionsmodul K ab, indem wir einen Würfel sukzessive (immer gleichem) einachsigen Druck entlang der drei Hauptachsen aussetzen.

- Als Ergebnis erhalten wir einen kleineren Würfel, dessen Dimensionen durch die angelegte Normalspannung, E -Modul E und *Querkontraktionszahl* ν gegeben sind.
- Damit ist die Volumenänderung ΔV berechenbar. Ein Vergleich mit der Definition des Kompressionsmodul K ergibt die gesuchte Beziehung zwischen E , ν und K .
- Hinweis:* Elastische Verformungen (außer bei Gummi) sind immer klein. Das bedeutet, daß höhere Potenzen von ϵ , z.B. ϵ^2 , ϵ^3 usw. vernachlässigt werden dürfen.



Lösung

Übung 7.1-3

Schwertbiegen

- Kann das im [Link](#) beschriebene Schwert tatsächlich die genannte "Verbiegungseigenschaft":
- *Dann, falls das Schwert mit einem Streich und einem Schlag des rechten Armes des Meisters den Kopf des Sklaven ohne Scharte oder Riß vom Rumpf getrennt hat, und **die Klinge um den Körper eines Mannes gebogen werden kann ohne sich zu verbiegen**, mag das Schwert als perfekt gelten.*
- Um das Ganze zu formalisieren, betrachten wir ein Schwert der Dicke **d** und der Länge **$l = 1 \text{ m}$** . Es soll in einen perfekten Halbkreis gebogen werden, ohne sich zu verbiegen, d.h. die Verformung soll rein elastisch sein.
- Wir unterstellen, dass das Schwert aus Stahl besteht. Die zur Rechnung benötigten Daten sind
 - Elastizitätsmodul Stahl $\approx 100 \text{ GPa}$
 - Fließgrenze **R_p** je nach Sorte **$(0.5 - 2) \text{ GPa}$** .
 - Kann man für vernünftige Dicken **d** so ein Schwert produzieren?



Lösung

Lösung Übung 7.1-1

- Die Berechnung der Querkontraktionszahl $\nu = -(\epsilon_2 / \epsilon_1)$ für eine Zugverformung ohne Volumenänderung ist sehr einfach und wird hier nur skizziert.
- Der Einfachheit halber betrachten wir einen Würfel mit der Seitenlänge 1 und damit dem Volumen $V = 1$
 - In Zugrichtung ändert sich die Länge von 1 auf $1 + \epsilon_1$, quer dazu auf $1 + \epsilon_2$ oder $1 - \nu\epsilon_1$.
Damit wird das Volumen der gezogenen Probe

Illustration

$$\begin{aligned}
 V &= (1 + \epsilon_1) \cdot (1 - \nu\epsilon_1)^2 \\
 &= 1 - 2\nu\epsilon_1 + \epsilon_1 \stackrel{!}{=} 1
 \end{aligned}$$

- Dabei haben wir das quadratische Glied vernachlässigt, da ϵ immer klein ist-.
- Auflösen nach ν ergibt das Ergebnis $\nu = \frac{1}{2}$ für Verformung ohne Volumenänderung.

Lösung Übung 7.1-2

Illustration

- Verformen wir einen Würfel der Kantenlänge 1 ändert sich die Länge in Zugrichtung von 1 auf $1 + \epsilon_1$, quer dazu auf $1 + \epsilon_2$ oder $1 - \nu \epsilon_1$.
Damit wird das Volumen der gezogenen Probe (Unter Vernachlässigung von ϵ^2):

$$\begin{aligned} V &= (1 + \epsilon_1) \cdot (1 - \nu \epsilon_1)^2 \\ &= 1 - 2\nu \epsilon_1 + \epsilon_1 \end{aligned}$$

- Das war schon das [Ergebnis von Aufgabe 7.1-1](#). Für die relative Volumenänderung $\Delta V / V$ erhalten wie

$$\Delta V / V = \epsilon_1(1 - 2\nu)$$

- Wenn wir nun auch in die beiden anderen Richtungen entsprechend verformen, verdreifachen wir schlicht das Ergebnis und erhalten für die gesamte Volumenänder $\Delta V / V = 3\epsilon_1(1 - 2\nu)$..
Der Kompressionsmodul K ist definiert als $K = \sigma \cdot V / \Delta V$; der E-Modul E ist $E = \sigma / \epsilon$. Damit können wir schreiben

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{V} &= \frac{\sigma}{K} = 3\epsilon_1(1 - 2\nu) \\ K &= \frac{\sigma}{\epsilon_1(1 - 2\nu)} = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \end{aligned}$$

- Genähet haben wir indirekt, da bei der Volumenberechnung die "Ecken" und "Kanten" herausgefallen sind; mal darüber nachdenken.

Lösungen zur Übung 7.1-3

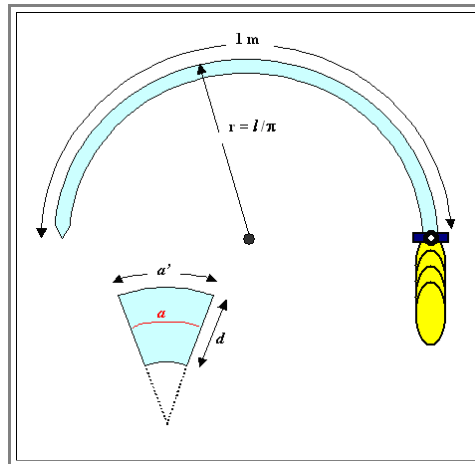
Schwertbiegen

Illustration

Kann man für vernünftige Dicken d ein **1 m** langes Schwert produzieren, das sich rein elastisch in einen Halbkreis biegen lässt?

Das geht nur, wenn die Dehnung des am stärksten gedehnte Teils noch im elastischen Bereich liegt.

Am stärksten gedehnt ist der kreisäußere Teil des Schwerts. In Aufsicht sieht das so aus:



In dem (übertrieben dick dargestellten) Segment wird klar, daß die Außenseite gedehnt, und die Innenseite gestaucht ist. Genau in der Mitte läuft die gedachte (rot gezeichnete) "neutrale Faser", die nicht verformt ist, d.h. sie ist immer noch **1 m** lang

Die Dehnung ϵ der Außenseite in dem gezeichneten Segment ist $(a' - a)/a$; sie ist entlang des Schwertes in jedem Segment überall gleich groß solange wir einen Halbkreis haben.

Elementare Geometrie ergibt für ein in einen Halbkreis gebogenes Schwert der Länge l und der Dicke d

$$\epsilon = \frac{d}{2r} = \frac{\pi \cdot d}{2l}$$

Die Verformung bleibt elastisch, solange in der am stärksten verformten Außenseite nicht die Fließspannung R_p erreicht wird, ab der sich das Material plastisch verformen würde. (Wir ignorieren dabei, was bei Stauchung so alles passieren könnte).

Die Spannung ist bei elastischer Verformung mit der Dehnung über den E -Modul verknüpft. Damit wird die Verformung elastisch bleiben, solange gilt

$$\begin{aligned} \sigma &= E \cdot \epsilon < R_p \\ \frac{\pi \cdot d \cdot E}{2l} &< R_p \\ d &< \frac{2 R_p \cdot l}{\pi \cdot E} \end{aligned}$$

Mit den Zahlenwerten $E = 100 \text{ GPa}$, $R_p = (0.5 - 2) \text{ GPa}$, $l = 1 \text{ m}$ erhält man sofort

$$d < \frac{2 \cdot 0.5 \cdot 1 \text{ N} \cdot \text{m} \cdot \text{m}^2}{3.14 \cdot 100 \text{ m}^2 \cdot \text{N}} = 3.18 \text{ mm}$$

$$\frac{2 \cdot 1 \text{ N} \cdot \text{m} \cdot \text{m}^2}{3.14 \cdot 100 \text{ m}^2 \cdot \text{N}} = 12.74 \text{ mm}$$

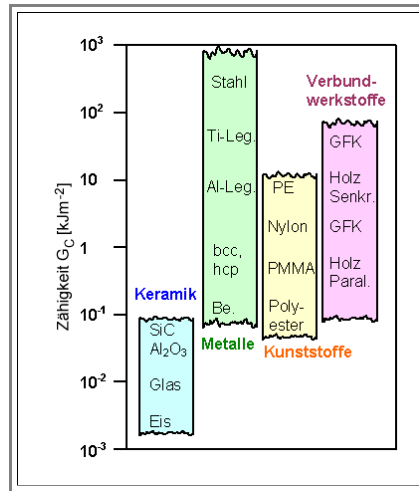
Die Antwort lautet also: Ja es geht - im Prinzip. Denn vorausgesetzt haben wir, dass das Schwert vollständig homogen ist, d. h. keine lokalen Schwachstellen hat, und dass es die Dehnung, nicht die Stauchung (= negative Dehnung) ist, die die plastische Verformung oder den Bruch bestimmt.

Zähigkeiten im Vergleich

Hier ist ein Diagramm, das die Zähigkeit G_C einiger Materialien im direkten Vergleich darstellt.

Es stammt, wie viel ähnliche Diagramme, aus dem unvergleichlichen "[Ashby and Jones](#)"

Illustration



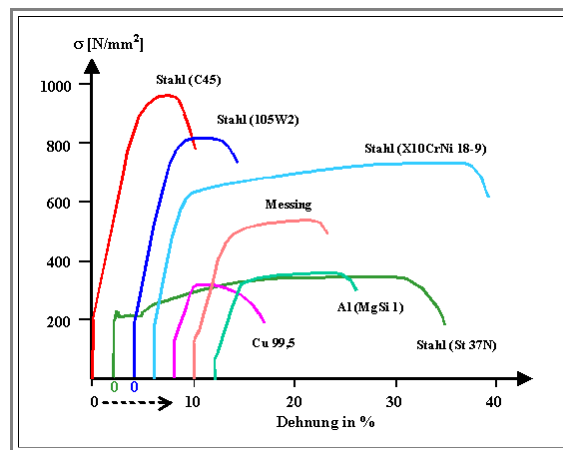
Wir sehen was wir eh' schon wissen: Glas ist spröder als Metall.

Aber jetzt können wir das auch *beziiffern*: Fensterglas, mit einem G_C Wert von ca. 10^{-2} kJ/m² ist ca. **10.000** mal spröder als Stahl!

Spannungs - Dehnungskurven realer duktiler Materialien

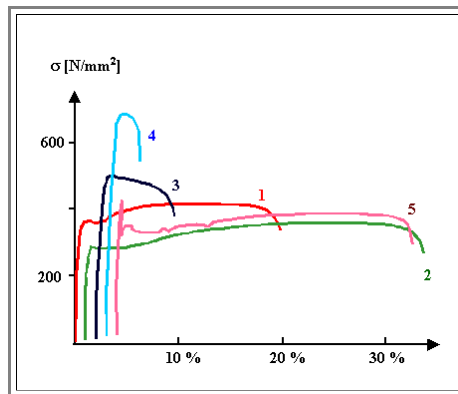
Illustration

Hier einige frisch gemessene Verformungskurven. Zunächst die Spannungs-Dehnungskurven *verschiedener* Metalle.



Die Kurven sind der leichten Übersichtlichkeit halber auf der Dehnungsachse um jeweils 2 % verschoben.

Hier ein einziges Material mit verschiedenen Vorbehandlungen: es handelt sich um **StW22** Stahl.



Die Kurven sind der leichten Übersichtlichkeit halber auf der Dehnungsachse um jeweils 2 % verschoben. Wir haben

1. Die Probe wie geliefert.
2. Die Probe wie geliefert, nach einer Temperung bei **860 °C** für **15 min**.
3. Die Probe nach einer vorhergehenden *Verformung* (nicht *Dehnung*) um **10%**.
4. Die Probe nach einer vorhergehenden Verformung um **55%**.
5. Die um **55%** verformte Probe nach einer erneuten Temperung bei **650 °C** für **60 min**.

Der Unterschied zwischen **Verformung** und **Dehnung** ist wichtig:

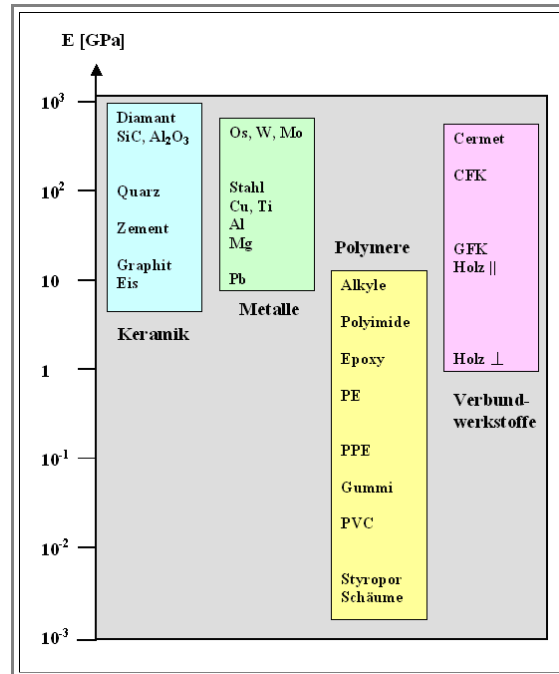
Man kann das Material zwar nach Maßgabe des obigen Diagramms in einem Experiment höchstens um ca. **35 %** *dehnen*, aber (in mehreren Experimenten) fast beliebig *verformen*, z.B. durch wiederholtes Walzen.

Elastizitätsmodul in Zahlen

Illustration

Zunächst eine grobe Übersicht nach Materialgruppen.

- Die Komposition stammt aus dem "[Ashby und Jones](#)" Die Eintrugungen geben selbstverständlich nur die Größenordnung an.
- Dicht unter **10³ GPa** liegt auch die theoretische Grenze. Da wir den **E**-Modul aus dem Bindungspotential [herleiten können](#), und da Bindungspotentialen heutzutage ziemlich gut bekannt sind, kann man das mit einiger Sicherheit behaupten.



Hier Zahlenwerte in einer Tabelle, ebenfalls aus dem "Asby / Jones". Die Maßeinheit ist immer **GPa = 10⁹ N/m²**

- Beachte:** Der **E**-Modul hat nichts mit **Härte** zu tun; insbesondere nicht bei plastisch verformbaren Metallen! Deswegen unterscheiden sich die **E**-Module von hartem Stahl und weichem Kupfer nicht besonders!
- Härte** mißt die **Fließgrenze** oder kritische Fließspannung **R_p**; d.h. bei welcher Spannung plastische Verformung einsetzt, und **nicht** die Steigung der Spannungs-Dehnungskurven im elastischen Bereich.

E-Modul [GPa = 10⁹ N/m²]							
Keramiken		Metalle		Polymere		Verbundwerkstoffe	
Diamant	1000	Osmium (Os)	551	Alkyde	20	CKG "Carbonfaser"	70 - 200
WC; Ti, Zr, Hf Boride	≈ 500	Wolfram (W)	406	Melamine	6 - 7	Bor - Epoxy	125
SiC	450	Molybdän (Mo)	≈ 350	Polyimide	3 - 5	GFK "Glasfaser"	7 - 45
Bor (B)	441	Cr	289	Polyester	1 - 5	Holz parallel Faser	9 - 16
TaC, NbC, Si ₃ N ₄	≈ 340	Ni	214	Acrylate "Plexiglas"	1.5 - 3	Holz senkrecht Faser	0.6 - 1
MgO	250	Stähle	190 - 214	Nylon	2 - 4		
ZrO	≈ 200	Fe	196	Epoxy	3		
ZrO ₂	145	Pt; U	172	Polyäthylen	0.7		

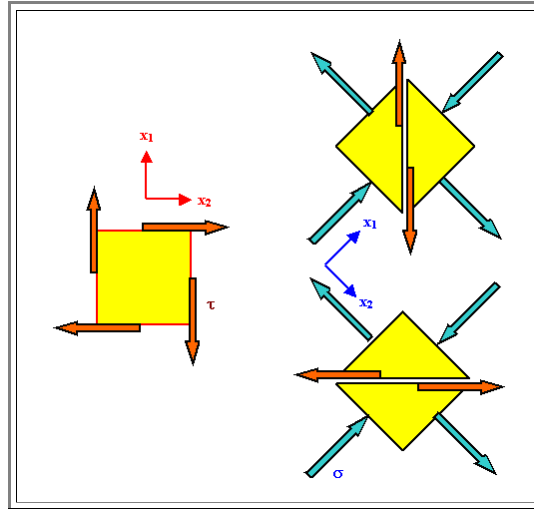
Si	107	Ta	≈ 150	Polyurethanschaum "Bauschaum"	0.01 - 0.06		
SiO ₂	94	Cu	124	Elastomere "Gummi"	0.01 - 0.1		
Granit	≈ 60	Ti	116	PVC	0.003 - 0.01		
Zement; Beton	≈ 50	Au	82	Schaum "Styropor"	0.001 - 0.01		
Kalzit (Marmor, Kalkstein)	81	Al	≈ 70				
Graphit	27	Sn, Mg	≈ 40				
Eis (H ₂ O)	9.1	Pb	≈ 14				

- Man sollte sich nicht daran stören, dass **Si** hier als Keramik gilt. Granit hätte man auch als Verbundwerkstoff werten können, usw.

Transformation einer reinen Scherung auf Normalspannungen

Illustration

- The picture below shows how a transformation of the coordinate system can produce pure *shear* stress on the chosen planes of your material for pure *normal* stresses in the new system.
- Since coordinate transformations are not without some problems, let's discuss what we see in the figure.



- The situation on the left is pretty much what we introduced as [pure shear strain before](#). The coordinate system is shown in *red*.
- Now we change the coordinate system to the *blue* one - we rotate the coordinate system by **45°**.
- We do not rotate the body of material, however!*. The yellow squares shown are *unit squares of the coordinate system*, not a piece of the material.
- The blue vectors denoting the force that belongs to the stress on the unit square are obtained by using the proper transformation formulae for the stress tensor.
- On the chosen planes of the material *which are the same and not rotated* we have the same shear stress as before. This is most easily realized if we use the ["cutting" procedure](#); shown by dividing the unit square in triangles.
- The forces we need to apply to the surface of the cut is a pure shear force; this is true, as shown, for both orientations.
- Simple vector addition (and taking into account the different size of the areas) tells us that the shear stress τ acting on the "old" plane in the new system is

$$\tau = \sigma$$

- See also the module dealing with the [relation of Youngs modulus and the shear modulus](#), where more detailed information is given.

Names and Steel

Advanced

Here is the list of **names** around steel from the [backbone](#):

- **Cementite** (German: **Zementit**). The stoichiometric Fe_3C phase. It is a compound with a complicated lattice and rather hard and brittle.
- **Ferrite** (German: **Ferrit**). The α -phase with the **bcc** lattice. If you want to be precise, you call it α - ferrite.
- **Austenite** (German **Austenit**). The γ -phase with the **fcc** lattice.
- **Pearlite** (German: **Perlit**), the two phase mixture obtained right below the eutectoid point at **0.8 % C** concentration
- **Ledeburite** (German: **Ledeburit**); the two phase mixture obtained right below the eutectic point at **4.5 % C** concentration.
- **Martensite** (German: **Martensit**); a kind of metastable version of **austenite** + carbon; but with a tetragonal lattice and different mechanical properties.
- **Bainite** (German: **Bainit**); a mixture of α - ferrite supersaturated with carbon and **cementite**, but in a (non-equilibrium) structure quite different from **pearlite**.

How did those names come into being? Let's see:

The name **Cementite** - you might have guessed it - has something to do with the english word "**cement**", meaning something that binds or glues things together in this context.

In the words of a dictionary. "In **1885**, Osmond and Werth published their "Cell-Theory", in which not only the existence of allotropic forms of iron was proposed (now known as austenite and ferrite), but in which also a new look at carbide formation was given. Their research on high-carbon steels, showed that the matrix consisted of grains or cells of iron, encapsulated by a thin layer of iron carbide. During solidification, iron globules, or cells, are formed first and continue to grow. The remaining melt solidifies as ironcarbide. In this way, the carbide-phase actually **glues** or **binds** the previous formed cells together. This view makes it understandable why Osmond called the iron-carbide thus formed, "**Ciment**" (French for binder or cement)".

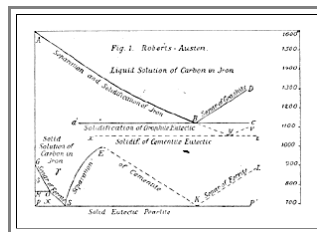
Since English and German have words quite similar to the french **ciment**, the precise name did not stick globally but is "**cementite**" in English and "**Zementit**" in German.

Ferrite is practically self-explaining:

Ferrum is the Latin root for many modern words around iron and iron compounds. The word ferrum is possibly of Semitic origin.

Austenite was named after Sir William Chandler **Roberts-Austen**, a British metallurgist (**1843–1902**).

Roberts-Austen published the first iron-carbon phase diagram; in preliminary form **1897** (below), and in a "final" form in **1899**.



He is also remembered for being the first scientist who performed a quantitative measurement of diffusion in the solid state (**Au** in **Pb**) after [A. Fick established his diffusion laws](#).

Pearlite has its name from the pearl-like luster and iridescence of its appearance.

I could not yet find out, who coined this name and made it stick.


However, quite recent research can provide an explanation why this particular structure is pearl-like in appearance: The regular spaced lamellae of optically quite different materials form a kind of "**photonic crystal**" with optical properties quite different from those of the constituents. Real pearls get their luster from the same mechanism; the name "Pearlite" thus is more fitting than its inventor could have known.


Ledeburite is named after Adolf **Ledebur** (**1837-1916**).

Ledebur was the first Professor for "Eisenhüttenkunde" at the (famous) Bergakademie Freiberg. In **1882** he discovered the iron-carbon "Mischkristalle" and became relatively famous. "Ledeburite" as a name for the iron - cementite eutectic was adopted in honor of his achievements.

Martensite was named after Adolf **Martens** (**1850 - 1914**).

Martens started as an engineer, made it to the director of the royal mechanical laboratory, which evolved into the "Staatliche Materialprüfungsamt" in Berlin. In Germany, a prestigious prize is now awarded in his name.

 **Bainite** is named after the American chemist E. C. **Bain**. In the words of an **US** source:

-  "The history of austempering begins in the **1930's**, when Grossman and Bain, working for the United States Steel Laboratories, were evaluating the metallurgical response of steels cooled rapidly from **1450°F (788°C)** to intermittently high temperatures and held for various times. The outcome of their pioneering research is what we now commonly call the "isothermal transformation diagram" Grossman and Bain were familiar with the conventional metallurgical structures of ferrite, pearlite and martensite. What they discovered, however, was another structure, formed above the martensite start temperature (M_s) and below the pearlite formation region. In steels, this structure took the form of an acicular (plate-like) structure with a feathery appearance. X-ray diffraction later identified this structure as a combination of ferrite and metal carbide. The resultant structure, termed "**Bainite**" was found to be stronger and tougher than a comparable "quenched and tempered" structure.

Hardness

Advanced

All people, without exception, have a pretty good idea of what "hardness" means in the context of materials properties. Extremely few people, however, have a decent notion of what the terms "yield stress" or "maximum elongation" tells us about materials properties.

- Ironically, while the two latter properties are well-defined, hardness is not!
- Yield stress**, as we know, can be measured in precisely defined ways, and can be expressed in terms of basic material properties.
- Hardness** is different. It is not uniquely defined, and that means there is no unambiguous way of measuring it. There are only some **recipes** - that's why we have several hardness scales in parallel.

Essentially, there are two types of basic hardness measurement set-ups (plus some more unusual principles).

- 1. Measure the **size** of an indentation made by some indenter under a known load. The following hardness tests use this principle:
 - Vickers**
 - Brinell**
 - Knoop
- 2. Measure the **depth** to which an indenter penetrates under specified conditions. The following hardness tests use this principle:
 - Rockwell B**
 - Rockwell C**
 - Shore A**
- More unusual or outdated are
 - Mohs** hardness scale (the first one), defined via "what scratches what".
 - Shore scleroscope principle: measure the rebound of a ball or hammer.

In the "[Materials in Action](#)" series, "Structural Materials", page **100**, the scales are compared (which is not easy).

- Here we usually use the **Vickers scale**. It runs from **0** to about **3000**; the unit is essentially that of stress (**Pa**); but the numbers are given in outdated units:
- In the "Materials in Action" series you will find an unusual unit: "**kgf**", which is **kilogram-force**, which is something different from a "**kg**", because that was and is a mass. Nevertheless, the unit for the hardness is **kg/mm²**; what is meant is the force that a mass of one **kg** experiences in the gravitational field of the earth. In German the unit "kilopond" (**kp**) was used; it's the same thing. Of course **we have** $1\text{kg/mm}^2 \approx 10\text{N}/10^{-6}\text{m}^2 = 10^{-5}\text{Pa}$

Here is a table with some **Vickers hardness** data:

Material	Vickers hardness	Material	Vickers hardness	Material	Vickers hardness
Sn	5	Limestone	250	Polypropylene	7
Al	25	MgO	500	Polycarbonate	14
Au	35	Window glas	550	PVC	16
Cu	40	granite	850	Epoxy	45
Fe	80	quartz	1200		
Mild steel	140	Al ₂ O ₃	2500		
Hardened steel	900	WC	2500		

Hardness measures in some lumped way a combination of elastic, plastic, and fracture properties, i.e. it combines somehow Yield stress, Youngs modulus and fracture parameters.

- There is, however, no unique formula giving the hardness number as a function of the primary parameters.

The best one can do is to provide some approximate relations for certain classes of materials.

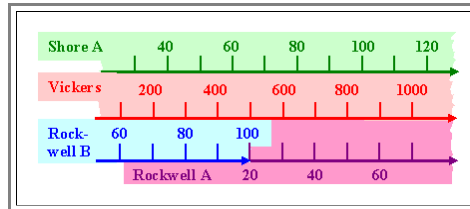
- For relatively soft metals and for steel, respectively, there is a very simple relation between the Vickers Hardness H_V and the yield stress R_p or the tensile strength R_M

$$H_V \approx \begin{matrix} 3 R_p & \text{"soft" metals} \\ 3.2 R_M & \text{steel} \end{matrix}$$

- Of course, you have to express the strength parameters in kg/mm^2 , too

This makes life easier and explains why we have not much dealt with hardness here: For our materials of interest, it is essentially the same as the much better defined parameters governing plastic deformation.

- Life would be even more easier, if most scientists would use the same hardness scale. Of course, they don't, so here is an approximate conversion, adopted from the "Materials in Action" Series [already mentioned](#).



Some Major Steels

General remarks

Advanced

All commercial steels have some code number that identifies what is. Unfortunately, there is no universal system. Much in use is the system of the "British Standard Intitute" (**BSI**). But then we have "old" and "new" "**BS**" identifieres; and the Americans have of course there own systems. The most commonly used system of designation in the United States is that of the Society of Automotive Engineers (**SAE**), or of the (American Iron and Steel Institute) **AISI**, or the combined **SAE-AISI** system.

- Then we have the German **DIN** norm, the Japanese and so on and so forth. Not to mention, the names the steel producing companies give their products.
- It also goes without saying that people stick to the norms only loosely.
- In short, it is a mess.

Just for a taste treat, here are the (greatly abbreviated) systems behind two versions.

- BSI** There are always **6** digits; the meaning is
 - The first three digits denote the general family: **000 - 199** for plain carbon steels, **300 - 499** for stainless steel, and so forth.
 - The fourth character denotes the major property (**A** = chemical composition, **M** = mechanical properties, **H** = hardenability, **S** = stainless, etc.
 - The last two digits give the carbon content times **100**.
- AISI** There are four to five digits:
 - The first two digits refer to the major alloying elements in code.
 - The last two or three digits give the carbon content times **100** (**xx40** = **0,4 % C**; **xx120** = **1,2% C**)
- In short, steel names are a science in itself, the Internet, however, offers complex translation tables.

Plain Carbon Steels

To keep with tradition, we allow a little bit of **Mn** and **Si** into the mix, and still count it as plain carbon steel.

Plain carbon steels (including the sub-specification of "mild" steels), are still the most popular kinds of steel; they are the "workhorse" of the "metallbending industry" (which includes car making and large parts of building constructions) and account for about **90 %** of the steels produced.

- Their most important property is their (low) price and their often good workability and weldability. This compensates for the not-so-good properties in comparison to more sophisticated alloy steels.

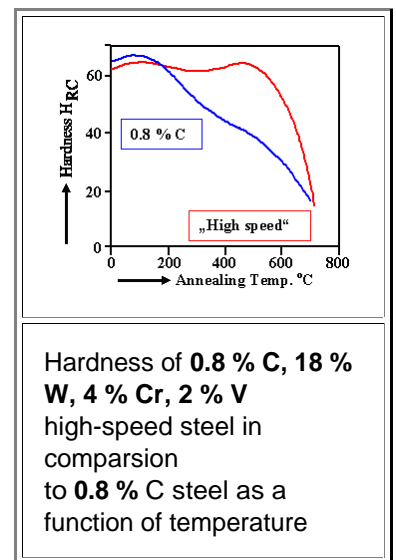
Tool Steels

Tool steels must be very hard - after all you want them to cut regular steel on a lathe or with your power drill.

- Essentially you use high-carbon steel; the most common mixture is **1 % C** and **0.3 % Si**, **0.3 % Mn**. Properly quenched and tempered, at least the outer cutting part will be hard.
- However, if the tool becomes hot - and that happens whenever you try to cut metal - you may loose the hardness because you "run the temper", i.e. anneal the martensite. This restricts you to low cutting speeds and plenty of cutting fluid use for cooling.

Economically, this is not so good, so you turn to **high-speed steels**.

- Use a high alloy steel, e.g. **1 % C** and **0.4 % Si**, **0.4 % Mn**, **4 % Cr**, **6 % Mo**, **6 % W**, **2 % V**, and **5 % Co**
- Quench and temper as usual, but now the **Mo**, **Mn**, and **Cr** will give you good hardenability, the cementite, finely dispersed together with the solution hardening if the other elements give you basic strength.
- If the tool now gets hot, say **500 °C - 600 °C** (more than enough to give you a good burn if you touch it), interesting things happen: The **Fe₃C** cementite particles dissolve, but the carbon they release now forms a fine dispersion of carbides - **Mo₂C**; **W₂C**, and **VC**
- At room temperature, these carbides, formed during what is called **secondary hardening**, make the steel even stronger than the original cementite particles.
- Of course, you now have a rich field for optimizing - which elements and how much of each; and there are many kinds of high speed steel. The picture shows a sample with a composition quite different from the composition given above.



➤ In total, getting your tool hot makes it stronger, not weaker - a big advantage for fast processing.

Medium Alloy Steels

- We did not discuss this subgroup in the [backbone text](#); but it contains interesting members of the steel family.
- If you own good tools, e.g. wrenches ("Schraubenschlüssel"), they may have been advertised as "Chrome Vanadium steel".
 - They usually contain more alloying elements than just the two mentioned, a typical composition might be **0.3 % C**, **0.75 % Mn**, **0.3 % Si**, **1.8 % Ni**, **0.87 % Cr**, **0.4 % Mo**, **0.1 % V**.
 - It appears that **Cr** and **V** have more "sex appeal" when it comes to selling than **Mo** or **Ni**; but there might also be historical reasons.
- "Chrome Vanadium steel" is also a steel of choice for springs - from small ones to truck suspension springs. Here is a typical composition:
- For stress springs – i.e. suspension springs, truck brake system or similar utilization with high working regimes and good relaxation properties; Diameters: **(3.00 - 12.50) mm**
(0.50 - 0.65) % C, **(35 - 1.65) % Si**, **(0.35 - 0.70) % Mn**, **(0.15 - 0.25) % V**, **(0.40 - 0.70) % Cr**, **<0.025 % P**; **S**, **<0.12 % Cu**.

Stainless Steels

- A typical ferritic stainless steel consists of **0.04 % C**, **0.45 % Mn** and **14 % Cr**.
- It is not particularly hard, but then it's mainly used for forks and spoons, where hardness is not required. It is stainless, but rather ductile, and easily shaped from thin sheet by stamping.
- If hardness is of concern e.g. for knives, or pairs of scissors, a martensitic grade is called for.
- **0.3 % C**, **13 % Cr**, **0.4 % Mn** will do the job. After hardening by martensite formation, the structure is tempered to a hardness range of **500 - 700 Hv**. In addition, some carbide formers like **Ti**, **Nb**, **V**, or in particular **Mo** might be added, to improve corrosion resistance in "salty" environments.

Austenitic Steels

- The most common austenitic steel is "18/8" with about **18 % Cr** and **8 % Ni**, **1 % Mn** and **(0.05 - 0.1) % C**.
- **Ni** and **Mn** stabilize the austenite at room temperature; the steel is non-magnetic and rather ductile. It can be shaped by cold-working, which will also lead to considerable work-hardening (a direct consequence of the fcc structure with its dislocation geometry).
 - Great for cold-drawing or pressing kitchen sinks and bowls; not so good for machining.
- A famous austenitic steel is "Hadfield's steel" from around **1890**, containing **13 % Mn** and **1.2 % C**.
- It combines maximum hardness with maximum strength. In its prime state, all the **Mn** and **C** is held in solid solution, but as soon as it is deformed, it will undergo a martensitic transformation nucleated by the deformation which leads to a hardening to about **500 - 550 Hv**.
 - This is particularly important wherever wear resistance is the ultimate requirement - the heavily impacted surface areas harden while the bulk keeps its resilience. In a way, that may have been the first "smart material".

Übung 8.1-1: Zahl der Gleitsysteme im bcc und hcp Gitter

Vervollständige die Tabelle aus dem Skript.

- Das ist schwieriger, als man meinen könnte. Genau genommen, können wir es ohne Zusatzinformationen in voller Schönheit gar nicht schaffen.
- Trotzdem sollte man mal kurz darüber nachdenken, bevor man die Lösung anklickt.

	fcc	bcc	hcp
Dichtest gepackte Ebenen	{111}		
Anzahl	4 (111), (-111), (1-11), (-1-11)		
Kürzestmöglicher b Vektor	$a/2\langle 110 \rangle$		
Anzahl pro Gleitebene	3 Auf (111): $a/2[110]$,		
Anzahl Gleitsysteme	12 (= 3 · 4)		

- Mache kleine Skizzen zu den Ebenen, und finde heraus, welche Kristalle "betroffen" sind.

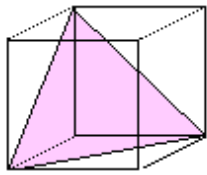
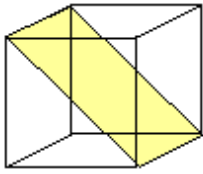
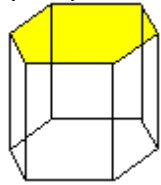
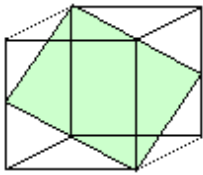
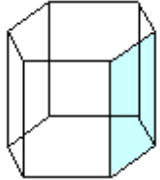
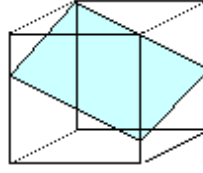
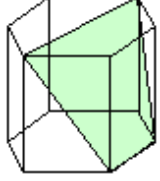


Lösung

Lösung Übung 8.1-1

Illustration

Hier zunächst die ausgefüllte Tabelle

	fcc	bcc		hcp	
Dichtest gepackte Ebenen		{110} 	α - Fe, W, Mo, β -Messing	{0001} 	Cd, Zn, Mg, Be, Al ₂ O ₃
		{211} 	α - Fe, W, Mo, Na	{10-10} 	Ti, Zr
		{321} 	α - Fe, K	{10-11} 	Ti, Mg (selten)
Bemerkungen	Keine anderen Ebenen haben ähnlich hohe Packungsdichten.	Die {110} Ebene ist zwar am dichtesten gepackt, aber die beiden anderen sind ähnlich. Die {211} Ebene enthält Stapelfehler (falls vorhanden). Alle Ebenen enthalten den $\langle 111 \rangle$ Typ Burgersvektor		Man spricht von "Basis"-, "Prismen"- und "Pyramiden"gleitung . Ohne Gleitung auf einer Nicht-Basisebene keine allgemeine Verformung!	
Anzahl	4 (111), (-111), (1-11), (-1-11)	{110}: 6 {211}: 12 {321}: 24		{0001}: 1 {10-10}: 3 {10-11}: 6	
Kürzest-möglicher \underline{b} Vektor	$a/2\langle 110 \rangle$	$a/2\langle 111 \rangle$		$1/3\langle 11-20 \rangle$	
Anzahl pro Gleitebene	3 Auf (111): $a/2[110]$,	{110}: 2 {211}: 1 {321}: 1		{0001}: 3 {10-10}: 1 {10-11}: 1	
Anzahl Gleitsysteme	12 (= 3 · 4)	{110}: 12 = 6 · 2 {211}: 12 = 12 · 1 {321}: 24 = 24 · 1		{0001}: 3 = 1 · 3 {10-10}: 3 = 3 · 1 {10-11}: 6 = 6 · 1	

So ganz einfach ist das nicht! Schaut man nur die eine Ebene mit der absolut höchsten Packungsdichte an, bekommt man ein falsches Bild von der Realität.

- Die "höchste Packungsdichte" Regel ist genau das: Eine Regel. Der Kristall weiß davon nichts, da diese Regel nicht aus ehernen Naturgesetzen zwangsläufig folgt. Eine Versetzung kann im Prinzip auf jeder Ebene "laufen", die ihren Burgersvektor und Linienvektor enthält. Da der Linienvektor mehr oder weniger frei wählbar ist, läßt das viele Möglichkeiten zu. Auf der dichtest gepackten Ebene ist das Laufen nur einfacher als auf anderen.
- Wenn, wie im hexagonalen Gitter, einfach zu wenig "ideale" Gleitsysteme existieren, wird einfach auch die "zweitbeste" Lösung für die Versetzungsbewegung vorkommen, da es (energetisch) immer noch besser ist, Spannungen in ungünstige Richtungen durch plastische Verformung (= Versetzungsbewegung) "mühsam" abzubauen, als sie zu erdulden.
- Im hexagonalen Gitter ist "dichtest gepackt" auch gar nicht so ganz eindeutig definiert, da reale Kristalle nicht immer das exakte Achsenverhältnis $c/a = 1.633$ haben. Zum Beispiel liegt **Be** bei **1.568** und **Cd** bei **1.886**.

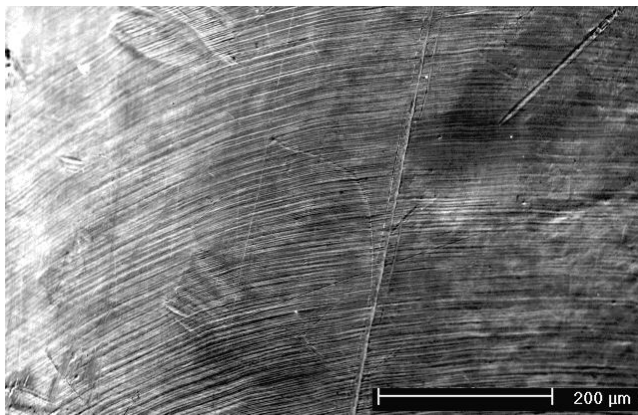
- Wie auch immer, die Tabelle macht klar, dass aus einer, an sich noch ziemlich simplen Geometrie, sehr schnell eine komplexe Situation entstehen kann, und dass die plastische Verformung selbst in einfachsten Idealsystemen eine Vielzahl von Erscheinungsformen haben kann und wird.

Verformung eines $\langle 123 \rangle$ Cu Einkristalls

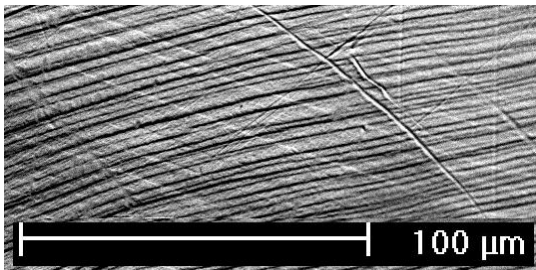
Illustration

Das [Motto zu Beginn des Hyperskripts](#) gilt auch hier: Auf dem Papier ist es einfach, einen $\langle 123 \rangle$ orientierten fcc Einkristall zu verformen; in der Praxis ist es eher problematisch

- Erstens sind Einkristalle eher selten (oder teuer), und zweitens sind sie so gut wie nie $\langle 123 \rangle$ orientiert. Silizium Einkristalle gibt es zwar reichlich und preiswert, aber sie sind immer $\langle 100 \rangle$ oder allenfalls noch $\langle 111 \rangle$ orientiert. Außerdem kann man sie bei Raumtemperatur gar nicht verformen; dazu müßte man sie kräftig heißmachen (so $>800^\circ\text{C}$).
 - Also muß man sie sich mühsam selber züchten, oder von jemand, der das kann, schenken lassen (so wie hier; der gezeigte Kristall ist von Herrn Prof. ... der Uni Münster; dort wurde er auch verformt).
- Hat man dann mit Mühe einen $\langle 123 \rangle$ Cu Einkristall etwas langezogen, kommt das nächste Problem: Wie fotografiert man (bei der notwendigen hohen Vergrößerung) die Gleitstufen auf einer stark gekrümmten Oberfläche?
- Optisch, mit einem normalen Mikroskop, geht das schlicht überhaupt nicht; der Schärfentiefbereich reicht nicht einmal ansatzweise.
 - Wir greifen also zum Rasterelektronenmikroskop (sofern vorhanden). Dort sieht die Oberfläche des jetzt leicht elliptischen Cu Einkristalls bei zwei Vergrößerungsstufen dann so aus (Wir schauen auf den flacheren Teil der Ellipse)



Cu Einkristall (kleine Vergrößerung)" TITLE="click to enlarge size">



Kristall (hohe Vergrößerung)" TITLE="click to enlarge size">

Alles in allem ist das genau das, was wir als Grundgeometrie erwartet hätten.

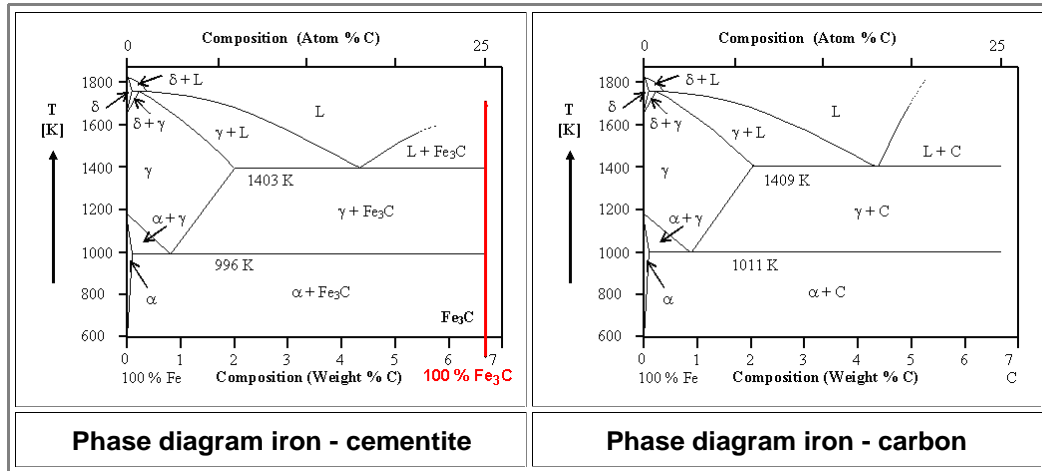
- Gegenüber dem [Papierbild](#) gibt es aber noch Zusatzinformation: Der Abstand der Gleitstufen ist einige wenige μm , das hätten wir aus der "Theorie" nicht so ohne weiteres ableiten können.
- Aus dem mittleren Abstand und der bekannten Gesamtverformung, kann man dann die mittlere Höhe der Gleitstufen errechnen; aus dem Bild ist das nicht direkt entnehmbar.

Phase Diagrams of the Iron - Carbon System

Below, the phase diagram of **Fe - Fe₃C**, as we already know it, is contrasted with the phase diagram of **Fe- C**

- Only the latter is a "true" phase diagram showing stable equilibrium phases. The former, however, is simply more important in a practical sense because it governs what we usually call "plain carbon steels".

Illustration



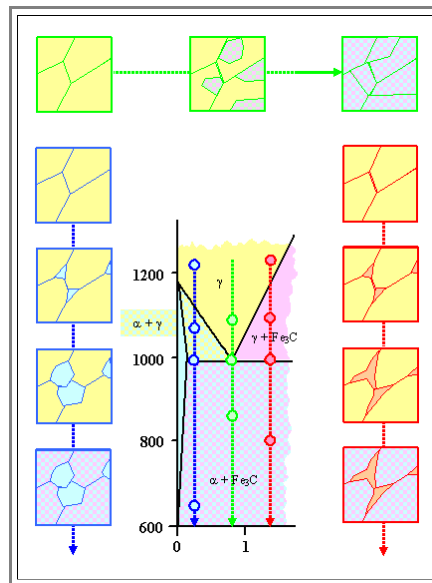
- As [stated in the text](#), the difference is rather small.

Kinetics of the Phase Formation in the Fe - C System

Illustration

Below the important part of the **Fe - C** phase diagram is shown. Three lines indicate hypoeutectic, eutectic and hypereutectic compositions.

If we look at what we will find at the indicated points, this is what we would expect:



In all three cases we start with some polycrystalline γ -structure: It is drawn identically in each case to point out that the basic phenomena are the same (and to save work).

For the blue *hypoeutectic* case, we start to grow some α phase as soon as we cross the boundary between the pure γ region and the $\alpha + \gamma$ mixed phase.

- It is pretty safe to assume that nucleation of the α grains starts at the grain boundaries, in particular at the nodes.

- At the eutectic temperature, the α grains have their maximal size. As soon as we cross over to the $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ eutectic, the pure γ grains must now transform to $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$, i.e. to perlite.

For the red *hypereutectic* case, pretty much the same thing happens

- We start to grow some Fe_3C , i.e. cementite, as soon as we cross the boundary between the pure γ region and the $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ mixed phase.

- It is pretty safe to assume that nucleation of the Fe_3C grains starts at the grain boundaries, but it is also sage to assume that it will be somehow different from the way the α grains did it. This is indicated schematically; we simply assume growth along the boundaries.

- How nucleation and growth takes place in reality, however, cannot be told from the phase diagram alone; we need some additional information.

- At the eutectic temperature, the cementite grains have their maximal size. As soon as we cross over to the $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ eutectic, the pure γ grains must now transform to $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$, i.e. to perlite.

It only remains to discuss what happens if we have the precise eutectoid composition; this is shown in green.

- It is simple enough. Below the eutectoid temperature, the the pure γ grains transform to $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$, i.e. to (pure) perlite.

- However, this does not happen everywhere all at once, again, some nucleation and growth takes place as indicated.

One important point becomes clear, no matter exactly what happens: The original grain structure of the γ phase determines very much what kind of grain structure we will have in the room temperature structure.

Alloying Elements and Properties of Steel

Here are a few major alloying elements for steel and some information about what they can do.

This list is based on the ["Materials in Action Series; Structural Materials"](#)

Illustration

Element	Influence on Ferrite	Influence on Hardenability	Tendency to form hard Carbides	Major Functions
Manganese Mn	Powerful solution strengthener	Moderate increase	Middle	1. Takes care of Sulphur (S) . 2. Cheap increase of hardenability.
Silicon Si	Hardens, but reduces ductility	Moderate increase	-	1. Deoxidation of liquid steel . 2. Improves oxidation resistance. 3. Strengthens low alloy steel. 4. Increases electrical resistivity (important for transformer cores).
Chromium Cr	Strengthens a little Provides corrosion resistance	Moderate increase	Strong	1. Corrosion resistance. 2. Hardenability. 3. Abrasion resistance (needs high C, too). 4. Strength + oxidation resistance at high T .
Titanium Ti	Age hardening possible	Very strong increase	Extremely strong	1. Forms hard carbides. 2. Prevents local depletion of C carbon in stainless steels due to Cr-carbide formation
Vanadium V	Moderate solid solution hardening	Very strong increase	Very strong	1. Restricts grain coarsening of austenite. 2. Increases hardenability. 3. Delays softening during tempering.
Nickel Ni	Strengthens	Mild improvement stabilizes austenite	-	1. Improves strength and toughness at subzero T . 2. Together with Cr provides austenitic steel.
Molybdenum Mo	Age hardening possible	Strong increase	Very strong	1. Increase hardenability. 2. Prevent embrittlement of certain Ni/Cr steels. 3. Keeps strength at higher T. 4. Restricts austenite grain growth . 5. Improves corrosion resistance of stainless steels . 6. Provides carbides with high abrasion resistance .
Cobalt Co	Strengthens in solid solution	Decreases slightly	Like Fe	1. Contributes hardness at moderately high T .

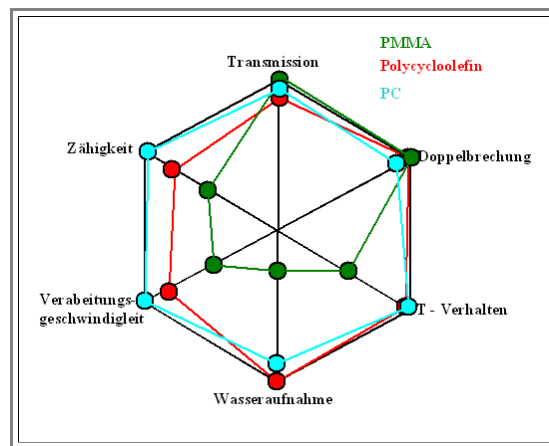
The list could go on for a while, of course. It includes some properties not much discussed before, for example:

- Behavior at low and/or high temperatures.
- Properties like wear (or abrasion) resistance or corrosion resistance (note that stainless steel, while oxidation resistant, might nevertheless corrode in some other chemical environment).
- Making steel in the first place (look for "liquid").
- Counteracting the effects of other elements.
- Keeping the structure from unwanted changes ("grain growth")

Polycarbonat

Advanced


- Polycarbonat ist das Basismaterial für die **CDs** und **DVDs**, ohne die man sich das heutige (2006) Leben eigentlich nicht mehr vorstellen kann.
- Nun ja. Die **CD** wurde **1982** eingeführt; ihr Speicherumfang liegt bei **650 MByte**. Die **DVD** folgte **1996** mit **(4.7 - 18) GByte**. Derzeit kommt die "Blue-ray disc" (**BD**) und die "high-density DVD" (**HD-DVD**) mit so **(15 - 100) GByte**.
- Während meiner Promotion in **1975** habe ich am **16 kbit (= 0.002 MByte)** **DRAM** Speicher mitentwickelt; statt **CDs** als Tonträger gab es die gute alte analoge Schallplatte, heute "**Vinyl**" geheißen. Computerähnliches für Otto Normalverbraucher gab es schlicht nicht.
- Die **CDs**, **DVDs** etc. wären nicht möglich ohne ihr Trägermaterial Polycarbonat. In **2004** wurden allein dafür ca. **800.000** Tonnen Polycarbonat gebraucht, mit Wachstumsraten um die **20 %** pro Jahr.
- Warum Polycarbonat? Was genau sind denn die Anforderungen an ein **CD** Material?
- So einfach und billig das Produkt zu sein scheint oder ist: Das Grundmaterial muss alle Bedingungen einer langen Liste von Anforderungen erfüllen. Hier die wichtigsten:
 - Hohe optische Transparenz.
 - Geringe (optische) Doppelbrechung.
 - Große (mechanische) **Zähigkeit** oder Schlagfestigkeit.
 - "Richtige" Glasatemperatur (nicht zu niedrig wg. **T**-Beständigkeit, nicht zu hoch wg. leichter Spritzgusstechnik.
 - Wenig Wasseraufnahme ("Quellen").
 - Kleine Viskosität im flüssigen Zustand.
 - Gute Wärmeleitung.
 - Billig.
- Ein Teil dieser Eigenschaften ist "nur" notwendig, damit das Produkt billig sein kann. Das ist aber genauso wichtig wie die "Kerneigenschaften", denn mit **CDs** im **€200.-** Preisbereich ließe sich letztlich nicht viel anfangen.
- Wie gut Polycarbonat (**PC**) hier liegt, kann man in einem Direktvergleich mit anderen Kunststoffen sehen:




- Optimale Erfüllung des Anspruchs ergibt einen Punkt ganz außen auf der Achse; mit größer werdenden Abweichungen wandert er nach Innen.
- Das ist im Übrigen eine sehr gebräuchliche Darstellungsart um eine gegebene Zahl von Eigenschaften qualitativ oder auch quantitativ (mit Zahlen an den Achsen) zu vergleichen. Man sieht sofort, dass **PC** gegenüber den beiden "Mitbewerbern" den besten Kompromiss darstellt.
- Wir haben hier wieder ein sehr gutes Beispiel für die Wichtigkeit der Optimierung **aller** benötigten Materialeigenschaften.


Quelle: MRS Bulletin Vol. 31 No. 4, 2006

Übung 9.2-1: Lösungen zum mechanischen Ersatzschaltbild

 Hier einige Übungen zum mechanischen Ersatzschaltbild

-  1. Zeige, daß die Differentialgleichung aus [Unterkapitel 9.2.2](#)

$$\sigma_{\text{ex}} = \epsilon_2 \cdot E_2 + \eta \cdot \frac{d\epsilon_2}{dt}$$

-  tatsächlich die folgende Lösung hat

$$\epsilon(t) = \frac{\sigma}{E_2} \left(1 - \exp - \left(\frac{E_2}{\eta} \cdot t \right) \right)$$



Lösung

Lösung Übung 9.2-1

Das ist eine ziemlich einfache Aufgabe. Aus dem gegebenen $\epsilon_2(t)$ berechnen wir zunächst $d\epsilon_2/dt$ zu

$$\frac{d\epsilon_2(t)}{dt} = \frac{\sigma_{ex}}{\eta} \exp - \left(\frac{E_2}{\eta} \cdot t \right)$$

- Umschreiben der [Ausgangsdifferentialgleichung](#) auf ϵ_2 ergibt

$$\epsilon_2 = \frac{\sigma_{ex}}{E_2} - \frac{\eta}{E_2} \frac{d\epsilon_2}{dt}$$

- Einsetzen von $d\epsilon_2/dt$ ergibt

$$\epsilon_2 = \frac{\sigma_{ex}}{E_2} \left(1 - \exp - \left(\frac{E_2}{\eta} \cdot t \right) \right)$$

- Das ist die [postulierte Lösung](#) - q.e.d.

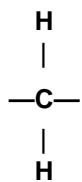
Monomere und Eigenschaften bekannter Kunststoffe

Thermoplaste

Illustration

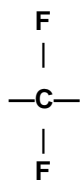
Hier ist eine Liste der bekanntesten **Thermoplaste**. Häufig ist uns nur die Abkürzung oder eine Handelsname geläufig.

Die chemische Nomenklatur mag uns zwar als Zungenbrecher erscheinen, aber das ist fast jedes deutsche Wort für unsere ausländischen Studierenden auch. Das Prinzip der Monomere ist nicht schwer, auch wenn der Name (ist ja schließlich nur Schall und Rauch) das manchmal zu implizieren scheint.



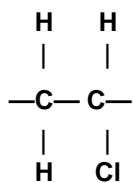
Polyethylen (**PE**)

Rohre, Verpackungen, Isolierung, Flaschen
(teilweise auch kristallin)



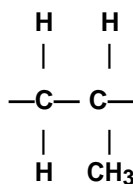
Polytetrafluorethylen (**PTFE**), auch **Teflon** genannt.

Hochtemperaturpolymer, niedrige Reibung
("Bratpfannenbeschichtung");
extreme chemisch Resistenz
Lager, Dichtung, Laborteile,
"Goretex" Membranen



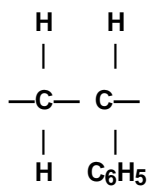
Polyvinylchlorid (**PVC**)

Kabelisolierung, Bodenbelag, Fensterrahmen Schallplatten
("**Vinyl**")



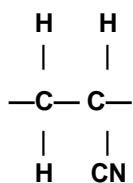
Polypropylene (**PP**)

Ähnlich **PE**, aber fester/steifer und lichtresistenter;
Seile



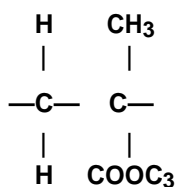
Polystyrol (geschäumt "**Styropor**")

Verpackungsmaterial, Formgußteile



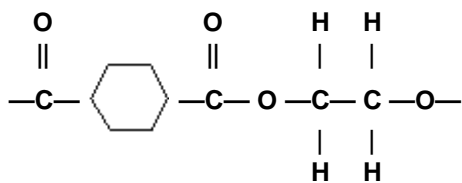
Polyacrylnitril

Acrylfasern ("**Orlon**", "**Dralon**")

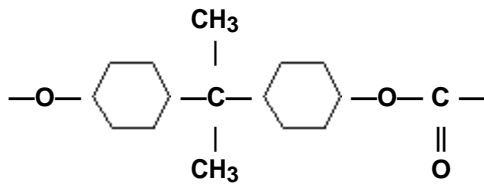


Polymethylmethacrylat (Plexiglas, Lucite), **PMMA**

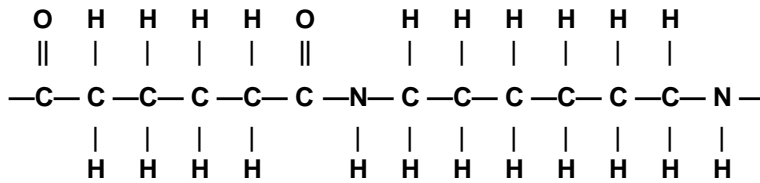
Flugzeugfenster, Sanitär, Möbel,...



Polyethylenterephthalat (**PET**)
Die moderne (Pfand)flasche,
Textilfasern, Magnetbänder, ...



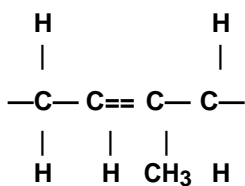
Polycarbonat
Schutzhelme, Stoßstangen und
insbesondere **CDs und DVDs**;
hält auch höhere Temperaturen aus.



Poly(hexamethylen-adipamid) =
Nylon
Fasern, Seile, Zahnräder,
Maschinenkomponenten, elektrische
Isolierung
insbesondere auch im gestreckten/
teilkristallinen Zustand.

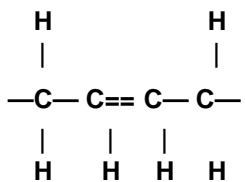
Elastomere

Hier einige **Elastomere**.



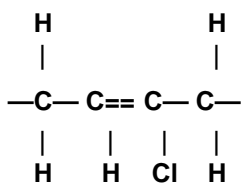
Polyisoprene (PE),
Naturkautschuk

Hat einen gigantischen Boom ausgelöst; war lange das
einzige verfügbare Elastomer



Polybutadien,
Synthetischer Gummi

Der Durchbruch in der Synthese

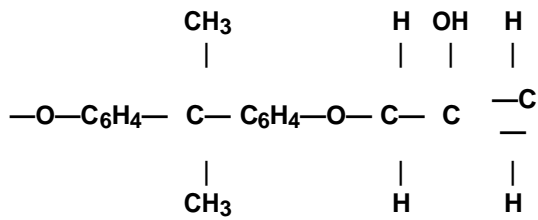


Polychloroprene (Neoprene)

Ölresistent, Schutzkleidung, Taucheranzug, ...

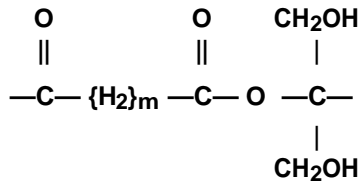
Duroplaste

Hier noch einige Duroplaste



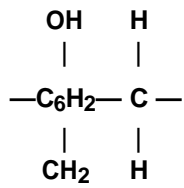
Epoxy

Epoxidharz;
Klebstoffe, Binder in Fiberglas (**GFK**,
CFK)
teuer



Polyester

"Fiberglas". Billiger als Epoxy



Phenolformaldehyd

Bakelit
Der Kunststoff der **30er** und danach

Entstehung der Atome

Advanced

- Was uns das Leben auf der Erde ermöglicht ist nicht nur die konstant Energiezufuhr durch die Sonne, sondern auch schlicht und ergreifend das Vorhandensein vieler Atomsorten.
- Zwar bräuchten wir nicht unbedingt alle **92** Elemente des [Periodensystems](#), aber doch eine ziemlich große Teilmenge daraus. Auf die meisten Isotope könnte wir verzichten; aber dafür ist es meistens auch ziemlich egal welche vorliegen - solange sie nur stabil sind.
- Woher stammen die Atome, aus denen sich die Erde zusammensetzt? Das Sonnensystem? Die Galaxis, oder gleich das ganze (sichtbare) Universum?
- Außer denen die schon da sind, werden ja (nach derzeitigem Dogma) keine neuen gemacht (die aus Kernfusionen und -spaltungen hervorgehenden neuen Sorten sind ja nicht wirklich *neu gemachte* Atome sondern nur umgewandelte alte).
- Die Antwort, soweit man sie geben kann, ist extrem spannend:
 - Der "[Urknall](#)", auf Englisch "**Big Bang**", hat vor rund und roh **15** Milliarden Jahren eigentlich nur Wasserstoff (**H**; ca. **75%**) und Helium (**He**; ca. **25%**) produziert, und noch Spuren von **Li**. Außerdem einen Haufen Photonen und "irgendwie" die numerischen Werte der [Naturkonstanten](#). Vielleicht auch noch extrem obskure "dunkle Materie" ("Dark Matter"), aber darüber ist nichts bekannt außer, dass noch was mit Masse im Universum vorhanden sein sollte damit die astronomisch beobachtete Gravitationsbilanz aufgeht.
 - Aber **H** und **He** reichen völlig aus, um erste Galaxien und Sonnen entstehen zu lassen. Die Sonnen fusionierten dann Wasserstoff zu (mehr) **He**, aber als die **H**- Dichte zu klein wurde, dann auch das **He** und so weiter zu den schwereren Elementen.
 - Irgenwann explodieren dann einige Sonnen als Supernova, und die ganze "Asche", die jetzt alle Atomsorten enthält (und immer noch überwiegend Wasserstoff), driftet durchs Universum. Irgendwann bilden sich dann daraus neue Sonnen, und mit Glück auch mal eine mit Planeten die für Kohlenstoff basiertes Leben geeignet sind.
 - Also bestehen wir komplett aus Sternestaub!
- Allerdings gibt es mit diesem einfachen Bild zwei Probleme:
 1. Es ist vielleicht purer Schwachsinn. Einen Urknall hat es nie gegeben, sondern "was anderes" - das Spektrum dazu reicht von wissenschaftlich fundierten Alternativen über zahlreiche Mythen bis zu knallharten "Creation" Modellen der fundamentalen Spielarten diverser Religionen. Ein kurzer Blick ins Internet zum Stichwort "big bang" wird Material ohne Ende produzieren.
 2. Auch im Rahmen des Standard "Big Bang" Modells gibt es *ein* besonderes physikalisches Problem: Die Fusion zweier Atome läuft mit Energiegewinn allenfalls bis zum **Fe** und vielleicht noch **Ni**, für höhere Atomgewichte funktioniert das nicht mehr. Aus Plutonium- und Uranatomen kann man bekanntlich Energie durch *Spaltung* gewinnen, also müsste man für die Synthese über Fusion Energie hineinstecken.
 - Damit haben wir aber schon mal ganz zwanglos verstanden, warum es so wahnsinnig viel **Fe** gibt (immerhin besteht die Erde im wesentlichen aus **Fe**; was wir wahrnehmen (die "Erdkruste") ist ja nur eine Art Schlacke, die auf dem flüssigen **Fe/Ni** Kern schwimmt): **Fe** hat einfach den stabilsten Atom*kern* - alle Fusions- oder Fissionsreaktionen enden früher oder später beim **Fe**.
- Da einige Alternativmodelle grundsätzlich nicht widerlegbar sind (was zwar noch lange nicht heißt, dass sie wahr sind, aber sehr wohl, dass sie damit nicht Objekt der Wissenschaft sein können), bleiben wir bei den Grundzügen des Big Bang Modells, und haben damit das Problem, die Entstehung der Elemente schwerer als **Fe** zu erklären.
 - Dafür nehmen wir Supernovas, also besonders dicke Sonnen. Sie produzieren "so nebenbei" auch mal schwerere Elemente solange sie noch brennen, richtig große Mengen aber sobald sie explodieren. Denn dabei wird soviel Energie frei, dass es auch zum gewalttätigen Zusammenbacken von leichteren Atomen noch langt.
- Bleibt nur noch ein *philosophisches* Problem: Alle einfachen Fusionsprozesse, die als Endprodukt Kohlenstoff (und damit auch alles darüber) produzieren, sind extrem unwahrscheinlich.
 - Hier ein Zitat dazu:
The synthesis of carbon--the vital core of all organic molecules--on a significant scale involves what scientists view as an astonishing coincidence in the ratio of the strong force to electromagnetism. This ratio makes it possible for carbon-12 to reach an excited state of exactly 7.65 MeV at the temperature typical of the centre of stars, which creates a resonance involving helium-4, beryllium-8, and carbon-12 — allowing the necessary binding to take place during a tiny window of opportunity 10-17 seconds long.
 - Kohlenstoff gibt es also nur, weil eine Naturkonstante genau den "richtigen" Wert hat.
- Die Behauptung, dass *alle* Naturkonstanten gerade den "richtigen" Wert haben, und dass schon kleine Änderungen der Zahlenwerte Leben wie wir es kennen unmöglich machen würde, ist bekannt als "**Anthropic principle**".
 - Darüber kann man natürlich heftig philosophieren (und sich streiten). Ein Blick ins Internet (oder in die "[Bibel](#)" des Anthropic principles) macht durchaus Spaß.

- Man kann statt Anthropic principle aber auch "anthropic *coincidence*" sagen, und damit herausstellen, dass in einem Universum, dessen Naturkonstanten Leben wie wir es kennen *nicht* zulassen, halt niemand da sein wird, um diesen Fakt zu bemerken. Da wir nun mal da sind (nur richtige "Denker" werden das eventuell bezweifeln), brauchen wir uns nicht zu wundern, dass wir Naturkonstanten mit den "richtigen" Werten finden.
- Auch einleuchtend, nur ein bißchen unökonomisch im Verbrauch von Universen: Falls *unseres* zufällig mit den richtigen Werten entstanden ist, müßte es noch ziemlich viele mit anderen Werten geben. Denn dass *einmal* Würfeln gleich hinhaut, ist ja auch nicht so wahrscheinlich.

Altern von Laserdioden

Advanced

In einer Wertanalyse der Fa. Cree (führend bei **SiC** Materialien und Schaltungen) kommt der Aktienmarkanalytiker **1998** zu einem sehr positivem Ergebnis. Er begründet dies auch damit, dass:

- "Cree announced in July **1997** a continous wave (**CW**) operation of its blue laser ...lasting more than **15 seconds**. This followed shortly after its June release of a pulsed **GaN** blue laser with a lifetime in excess of **1 hr**. This is a big deal, since management had expected it to take up to one year to progress from an electrically pulsed laser (pulsed for **1 ms per second**) to **CW** operations".
- Aha. Der gepulste Laser hat also insgesamt etwa **3,6** Sekunden wirklich gelast, und die **15** Sekunden Daueroperation waren ein "big deal". Bevor man so einen neuen Laser verkaufen kann, muß jedoch die Lebensdauer in der Regel mindestens **10 Jahre (= 87 600 hr)** betragen.
- Wie ging es weiter? Im Oktober **2000** hat Cree **100 hr CW** Betrieb erreicht (Osram spricht von **143** Stunden, und dass sie in **2005** welche verkaufen wollen).
- 2002** liest man dann: "Cree has announced that its **405 nm 3 mW** blue laser diodes exhibit a projected lifetime exceeding **10.000** hours (\approx **1 Jahr**) at room temperature. The company recently announced lifetimes of **1000** hours and began sampling laser diodes in December **2001**."
- Leider gibt es zur Zeit jede Menge Patentstreitigkeiten - wir werden sehen.

Warum geht der neue (tiefblaue) **GaN** Laser genau wie jeder andere neue Laser denn so schnell kaputt? Auch heute (Sept. **2003**) kann man ihn noch nicht so recht kaufen (er ist noch sehr teuer); obwohl die Menschheit in so gerne hätte (nochmalige Vervielfachung der Speicherkapazität einer **DVD**).

- Die Firma Cree wird niemanden verraten, an was ihr Laser so schnell stirbt; die Konkurrenz (darunter z.B. Osram) auch nicht. Immerhin liest man bei SONY folgendes

Laser diodes also deteriorate and fail due to crystal defects. Perfect semiconductor crystals have structures with a regular atom arrangement, but actual semiconductor crystals have crystal defects which are non-conforming portions in the atom arrangement. In addition, crystal defects may also be produced by mechanical stress applied to semiconductor chips in the laser diode manufacturing process. These crystal defects inside laser diodes have non-light emitting properties, and the energy provided when the power is on is converted to heat instead of light. Dark line defects (DLD) are when a dislocation, which is a type of crystal defect, grows and expands while the power is on. These DLD expand and grow faster at larger current densities or higher operating temperatures, and can cause degradation or failure. AlGaAs laser diodes often experience laser diode degradation due to DLD at approximately 100 hours, and this is called degradation by the rapid degradation mode.

Aha. Das Wort Versetzungsklettern wird zwar vermieden ("...dislocation grows and expands..."), aber die Botschaft ist klar.

- Exotische Prozesse tief aus der Folterkammer der Materialwissenschaft verhindern zur Zeit noch, dass wir über schöne neue Dinge verfügen können, und darunter wären sogar ganz nützliche Sachen.
- Wer's nicht weiß, würde es kaum glauben, wieviele Wissenschaftler sich mit Themen wie Versetzungsklettern abgeben. Hier noch der Abstract eines beliebig herausgegriffenen Papers zum Thema:

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

VOLUME 84, NUMBER 3

1 AUGUST 1998

Combined transmission electron microscopy and cathodoluminescence studies of degradation in electron-beam-pumped $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se/ZnSe}$ blue-green lasers

Jean-Marc Bonard^(a) and Jean-Daniel Ganière

Institut de Micro- et Optoelectronique, Département de Physique, Ecole Polytechnique Fédérale, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Lia Vanzetti,^(b) Jens J. Paggel,^(c) Lucia Sorba,^(d) and Alfonso Franciosi^(a)

Laboratorio Nazionale TASC-INFN, Area di Ricerca, Padriciano 99, I-34012 Trieste, Italy

Denis Hervé^(e) and Engin Molva

LETI (CEA-Technologies Avancées), Département Optronique, 17 rue des Martyrs, F-38054 Grenoble Cédex 9, France

(Received 15 December 1997; accepted for publication 17 April 1998)

We explored degradation in electron-beam-pumped $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se/ZnSe}$ laser structures by combining cathodoluminescence (CL) measurements in a scanning electron microscope with transmission electron microscopy. The rate of degradation, measured as the decrease of the emitted CL intensity under electron bombardment, depends critically on the threading dislocation density and on the strain in the quantum well. Degradation occurs via the formation of dark spot defects, which are related to bombardment-induced networks of dislocation loops in the quantum well. These degradation defects often initiate where threading dislocations cross the quantum well. We propose a self-supporting dislocation climb mechanism activated by nonradiative recombination to explain the formation and propagation of the degradation defects. © 1998 American Institute of Physics. [S0021-8979(98)07114-X]

Ganz schnell ein paar Worte zur "Geschichte" der "dark line defects; der **DLD**'s.

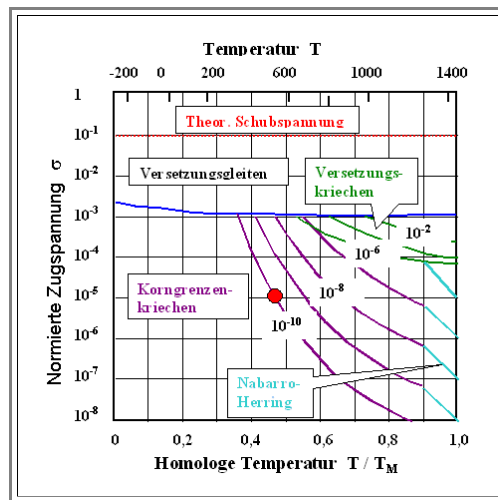
- Der Begriff stammt von Pierre Petroff und Hartmann, die **1973** als erste das Phänomen des schellen "Dunklerwerdens" von Laserdioden mit dem vollen Instrumentarium der modernen Analytik untersuchten.
- Zum Einsatz kam mikroskopische Lumineszenz, [Röntgentopographie](#) und [Transmissionselektronenmikroskopie \(TEM\)](#).

- Die letztere Methode kann Versetzungen "sehen", damit gelang die Identifizierung von Versetzungen als primärer Bösewicht. Auch das Klettern von Versetzungen etc. kann mit **TEM** beobachtet werden.

Verformungsdiagramme

Advanced

Hier ist ein Verformungsdiagramm von reinem **Ni**. In Diagrammen dieser Art steckt eine ungeheure Informationsdichte; sie gehen vor allem auf M.F. **Ashby** zurück.



Dargestellt ist der Verformungsmechanismus; soweit sinnvoll mit der **Verformungsgeschwindigkeit** $d\epsilon/dt$ als Parameter.

Aufgetragen ist die normierte Zugspannung über der homologen Temperatur, d.h.

- Die anliegende Zugspannung dividiert durch die Spannung bei der Fließgrenze.
- Die vorherrschende Temperatur dividiert durch die Schmelzpunkttemperatur.

Bei relativ hohen Spannungen bekommen wir "simples" Versetzungsgleiten ohne große Temperaturabhängigkeit; die Verformungsgeschwindigkeit ist naturgemäß immer relativ hoch.

Interessant ist der Bereich des Kriechens im allgemeinen, noch unterteilt in die verschiedenen Kriechmechanismen (die wir gar nicht alle behandelt haben). Betrachten wir als Beispiel, was geschieht, falls wir die Probe bei der homologen Temperatur von ca. **0,47** und der normierten Spannung von ca. **10^{-5}** halten (der rote "Arbeitspunkt").

Wir sind im Bereich des **Korngrenzenkriechens** und die Verformungsgeschwindigkeit beträgt **10^{-10} s^{-1}** . Das ist gleichbedeutend mit einer Verformung von ca. **5%** in **16 Jahren**; das kann man vielleicht noch tolerieren.

Falls wir aber Temperatur oder Belastung etwas erhöhen, landen wir schnell auf der **10^{-8} s^{-1}** Kurve - jetzt haben wir **5%** Verformung in **0,2 Jahren**; und das können wir wohl nicht mehr tolerieren.

Der Mechanismus ist **Korngrenzenkriechen**. Das legt nahe, dass die Korngröße eigentlich eine Rolle spielen müsste. Tut sie auch - das gezeigte Diagramm gilt nur für einen bestimmten Korngrößenbereich ("normale" Größe).

Es ist aber relativ klar, wie sich die Kurven verschieben, falls die Körner sehr groß oder sehr klein sein sollten.

Immerhin - und das ist wichtig - enthalten solche Verformungsdiagramme Aussagen über die relativ ferne Zukunft, und das ist es, was wir beim Kapitel "Alterung" dringend brauchen.

Allerdings ist nur **ein** Aspekt der Alterung angesprochen. Über Ermüdung, z.B., sagen diese Diagramme nichts aus.

Kristallisation von Gläsern

Illustration

- Es gibt viel Sorten von Glas - vom **Obsidian** und **Jade** als Naturstoff aus vulkanischer Produktion, über das antike Kunstglas bis hin zum heutigen Fensterglas, dem "**Bleikristall**" der stolzen Hausfrau (der aber kein Kristall sondern ein Glas ist) und den zahlreichen Spezialgläsern für z.B. optische Anwendungen.

 - Den meisten Gläsern gemeinsam ist die **SiO₂** Grundstruktur, in die verschiedene "Glasbilder" - z.B. **Na, K, B, ...** eingebaut sind. Alle sind metastabil; der kristalline Zustand wäre praktisch immer günstiger.
 - Um zum kristallinen Zustand zu kommen, muß eine Energiebarriere überwunden werden, die je nach Glassorte verschieden hoch sein kann.
- Manche Gläser sind deshalb recht stabil (Obsidian hält offensichtlich Jahrmillionen), manche kristallisieren langsam aber sicher (viele Gläser aus der Antike sind schon ziemlich weit), und bei manchen geht es recht zügig.

 - Bei vielen Gebrauchsgläsern reichen schon milde Temperaturerhöhungen auf $\approx 80\text{ °C}$ um innerhalb eines Jahres sichtbare Effekte zu erzeugen - an dieser Stelle beginnt das schöne Wörtchen "**spülmaschinenfest**" Sinn zu machen.
 - Störend ist dabei nur, daß die kleinen Kriställchen, die sich überall im Volumen bilden, **das Licht streuen** - das Glas sieht trübe aus und wird schließlich ganz weißlich. Da ein Weinglas in der Regel aber nicht stark mechanisch belastet wird, sind die kleinen Mikrorisse, die sich dabei bilden können, nicht so wichtig. Fällt es runter oder wirft man es an die Wand bricht es immer, egal ob neu oder alt.
- Bei anderen Gläsern ist das anders. Die Fenster im Düsenjet sind mechanisch stark belastet; ein Bruch hätte katastrophale Folgen. Die Bildung von Mikrorissen, die sich langsam vergrößern, muß auf jeden Fall vermieden werden.

 - Die Kristallisation läßt sich sowohl genau vorherbestimmen - als thermisch aktivierter Prozeß kann über den Boltzmannfaktor von Test bei höheren Temperaturen recht zuverlässig auf die Kinetik bei Betriebstemperaturen geschlossen werden - als auch durch geeignete Materialwahl verhindern.
 - Kritischer sind die Diamantringe der Passagiere, die absichtlich oder unabsichtlich Kratzer verursachen können, und - hier beginnt es spannend zu werden - manche organische Substanzen (besser gesagt Körperöle), die die Struktur von Glas negativ beeinflussen können.
- Fenster in Flugzeugen bestehen deshalb zwar aus Glas, das die mechanische Belastung aushält und - bei Fenstern wichtig - trotzdem durchsichtig sind; das Glas wird aber durch eine Kunststoffscheibe vor dem Einfluß der Passagiere geschützt!

Durchbrennen von Glühlampen

Illustration

- Die altbekannte Glühlampe, unter deren Alterung wir alle leiden, ist ein gutes Beispiel für die Bedeutung des Alterns für die Materialwissenschaft.
- Nachdem **Werner von Siemens** erstmals dafür gesorgt hatte, daß ausreichende Mengen an Elektrizität zur Verfügung standen, war die Basisinnovation bei den Glühlampen nicht die Idee, die notwendige Temperatur für die Weißglut des Strahler durch elektrische Heizung zu erzeugen, sondern das dafür geeignete Material zu finden. Das Material mußte zum einen den Strom leiten, zum anderen bei den hohen Temperaturen *lange leben* - unser typisches Metall macht das nicht ohne weiteres.
- Der Hauptgrund dafür ist, daß die Metalle mit hohem Schmelzpunkt bei Weißglut chemisch sehr reaktiv sind und damit ziemlich schnell zu einem Metalloxid werden.
- Erst **T.A. Edison**, der hunderte von Materialien ausprobierte, fand die Lösung: Ein Kohlefaden im Vakuum einer "Glühbirne".
- Heute nehmen wir in der Regel Wolframwendeln im **N₂** - Schutzgas einer Birne; die aber nicht allzu lange halten.
- Die Alterung wird durch die *Inhomogenität* der Temperatur an der **W** - Oberfläche verursacht: An Stellen, an denen der Draht etwas dünner ist, ist der Widerstand etwas größer, wegen elektr. Leistung = $R \cdot I^2$ wird das Metall dort etwas heißer - es reichen minimalste Unterschiede.
- An der etwa heißeren Stelle dampft **W** etwas schneller ab - die Wahrscheinlichkeit, daß ein Oberflächenatom genügend Energie erhält, um den Bindungskräften entfliehen zu können wird mit dem Boltzmannfaktor größer. Dadurch wird die dünne Stelle noch dünner, noch heißer, usw.
- Ein *gegenläufiger* Effekt ist die Oberflächendiffusion. Wolframatome, die durch Diffusion vor allem an der Oberfläche beweglich sind, laufen bevorzugt zur heißen Stelle und machen sie wieder dicker.
- Der schädliche Prozeß gewinnt aber - nach Meinung der Verbraucher viel zu schnell.
- Also findet die Materialwissenschaft gezielt ein Gegenmittel: Die **Halogenlampe**.
- Der bevorzugte Verdampfungsprozeß des **W** an dünnen Stellen läßt sich nicht direkt stoppen, also muß man die dünnen Stellen wieder dick machen. Dies gelingt durch Zugabe eines Halogens, z.B. **F**, in das Schutzgas.
- Wenn alles richtig gemacht ist, reagiert das verdampfte **W** mit dem **F** zu **WF₆**. Diese Molekül hat die schöne Eigenschaft, daß es sich an heißen Oberflächen wieder zersetzt; je heißer, desto besser.
- Damit werden die dünnen Stellen wieder bevorzugt mit **W** aufgefüllt - unsere Halogenbirne lebt erheblich länger als die normale Birne
- So *könnte* es sein. Die Lampenindustrie aber denkt anders. Sie richtet sich nach dem Verbraucher, und dem sind *hellerer* Birnen in vielen Fällen lieber als *langlebige*.
- Also wird bei Halogenlampen die Betriebstemperatur gerade um den Betrag höher gesetzt, der die Lebensdauer wieder in den Bereich des Normalen bringt. Die Lampe ist heller, das Licht ist weißer, sie lebt ein bißchen länger, der Umsatz bricht nicht ein (fast) alle sind zufrieden.