

Zur Vorlesung „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Online-Lesehilfe 1: Vorbemerkungen, Einleitung, Bindungspotential

Inhalt

Vorbemerkungen: Was für das gesamte Semester gilt

- 1.) Zum Vorlesungs- und Übungsbetrieb
- 2.) Zum allgemeinen Semesterbetrieb und zur Klausur

Kapitel 1: Einleitung

Unterkapitel 2.1 (Anfang): Bindungspotentiale und erste Eigenschaften

- 2.1.1 Das Bindungspotential
- 2.1.2 Bindungspotentiale, Federn und Elastizitätsmodul

Vorbemerkungen

1.) Zum Vorlesungs- und Übungsbetrieb

Diese „Online-Lesehilfen“ sollen die Präsenz-Vorlesung unterstützen, indem sie – parallel zur Vorlesung – dazu dienen, den roten Faden durch das Hyperskript zu legen. Sie präsentieren den Lehrstoff in zusammengefaßter Form; die Details sind dann selber zu erarbeiten, indem man sie im Skript (oder anderweitig, z. B. in einem Lehrbuch aus der Bibliothek – bitte **nicht nur** bei Wikipedia!) nachliest.

Dabei ist es keineswegs erforderlich, das gesamte Skript zu lesen, sondern nur eine Auswahl; diese sollte so getroffen werden, daß man die **Übungsaufgaben** und die zugehörigen **Musterlösungen** versteht – denn darauf wird sich ein Großteil der Klausur beziehen.

Die Übungsblätter werden sehr zeitig erscheinen, und zwar immer bereits mehr als 1 Woche vor dem eigentlichen Übungstermin; ihr Inhalt liefert einen ersten Hinweis darauf, was man sich im Skript näher anschauen sollte.

In den Übungen werden alle Aufgaben als Präsenzaufgaben behandelt. Hauptsächlich werde ich sie vorrechnen; eine spontane Beteiligung Ihrerseits ist möglich und sinnvoll. Die Musterlösungen werde ich direkt nach dem jeweiligen Übungstermin veröffentlichen.

Vor allem ist mir sowohl in der Vorlesung als auch in der Übung wichtig, daß Sie möglichst viel verstehen. Auch wenn es schwerfällt: Stellen Sie ruhig eine Zwischenfrage! Sie werden damit nicht allein sein. Ich habe kein Problem damit, die Vorlesung zu unterbrechen, um Fragen zu klären; ich habe auch kein Problem damit, etwas mehrmals zu erklären.

2.) Zum allgemeinen Semesterbetrieb und zur Klausur

Diese Vorlesung ist vom Stoff her umfangreich und anspruchsvoll. Sie findet trotzdem regulär bereits im 2. Semester statt, weil die Elektronik-Vorlesung von Prof. Kohlstedt (4. Semester) direkt darauf aufbaut, und in seiner Vorlesung wird er sehr viel Stoff vermitteln. Den können Sie besser „verdauen“, wenn Sie eine gute Grundlage mitbringen, und die sollen Sie hier in den „MaWi-Grundlagen“ bekommen.

Apropos Stoffumfang: Die Kapitel 9 (Halbleiter) und 10 (Bauelemente) sind nicht mehr Bestandteil der MaWi-Grundlagen-Vorlesung (und damit auch nicht klausurrelevant), denn sie

werden in der Elektronik-Vorlesung von Prof. Kohlstedt behandelt. Trotzdem werde ich am Ende des Semesters auch Teile des 9. Kapitels behandeln, und zwar aus mehreren Gründen:

(i) Die Sichtweisen von MaWis und E-Technikern unterscheiden sich etwas, was das Funktionieren von Halbleitern betrifft, und weil Sie es später auch mal mit MaWi-Kollegen zu tun bekommen können, sollten Sie auch deren „Sprache“ verstehen. (ii) Es wird in dem Kapitel um absolut grundlegende Aspekte der Halbleiterei gehen, und da ist es sinnvoll, wenn Sie die bereits gut verstanden haben, bevor Sie in die Vorlesung von Herrn Kohlstedt gehen. (iii) Ja, dadurch gibt es einen inhaltlichen Überlapp zwischen den beiden Vorlesungen – und das ist gut so, denn durch die Wiederholung verbessert sich der Lernerfolg.

Beim Nachlesen bestimmter Themen können die letzten drei Anhänge des Online-Skriptes hilfreich sein (siehe im linken Rand): Die „**Indexliste**“ enthält ein ausführliches Stichwortverzeichnis, unter der Rubrik „**Namen**“ findet man Verweise auf Stellen, an denen historisch bedeutsame Personen erwähnt sind, und „**Abkürzungen**“ ist selbsterklärend.

Sollten Sie einen Verweis auf ein Stichwort oder eine Abkürzung **vermissen**, teiles Sie mir das gern mit (per E-Mail: jwa@tf.uni-kiel.de; das gilt auch, wenn sich irgendwo ein Fehler im HTML-Skript findet, oder wenn irgend etwas unklar formuliert ist), dann Sorge ich dafür, daß das beim nächsten Update nachgetragen (bzw. korrigiert) wird.

Bitte legen Sie sich beim Umgang mit der Theorie folgende realitätsnahe Erwartungshaltung zu: Ein und dasselbe Formelzeichen kann je nach inhaltlichem Kontext ganz unterschiedliche Bedeutungen haben (Beispiel: E – Energie, elektrisches Feld, Elastizitätsmodul); daraus folgt, daß Sie beim Lesen der Gleichungen **mitdenken** müssen, um den Kontext zu berücksichtigen.

Das Hyperskript ist sehr alt: Prof. Föll hat damit bereits vor weit über 20 Jahren begonnen, aber weil es inhaltlich sehr gut ist, wird es heute noch verwendet – in nahezu unveränderter technischer Form; das betrifft hauptsächlich die mathematischen Formeln, die aus HTML-Sonderzeichen zusammengestrickt sind. Weil es auf diesem simplen Niveau keine Vektorpfeile gibt, werden Vektoren **ersatzweise** mit einem **Unterstrich** gekennzeichnet (so steht beispielsweise das Symbol \underline{E} für das elektrische Feld).

Apropos Formeln: In der Klausur ist **keine** Formelsammlung erlaubt – im Gegenteil: **Formeln und ihr Verständnis werden abgefragt**. Am Ende jedes Kapitels gibt es im Hyperskript den Abschnitt „Was man wissen muß“ mit einer großen Tabelle an „Zahlen und Formeln“, die im Laufe des Semesters mit dem jeweils neu behandelten Stoff mitwächst.

Lernen Sie das alles beizeiten **auswendig** (wie Vokabeln, die kontinuierlich dazukommen), sonst haben Sie am Ende des Semesters bzw. bei der Klausurvorbereitung einen recht dicken Brocken vor sich (vgl. diese Tabelle ganz am Ende der Vorlesung)!

Apropos Klausur: Sie wird aus 5 thematischen Aufgaben und einer allgemeinen Aufgabe mit der Überschrift „Formeln, Zahlen und Begriffe“ bestehen – von der Sie sich nun bereits denken können, woraus sie sich speist; zu den anderen 5 Aufgaben wird es am Ende des Semesters noch nähere Hinweise geben. Taschenrechner etc. sind in der Klausur auch nicht erlaubt.

Die thematischen Aufgaben der Klausur orientieren sich an den Übungsaufgaben. Weil alle Übungsaufgaben Präsenzaufgaben sind, sind für die Teilnahme an der Klausur keine Vorleistungen nötig.

Die Überschrift dieser Lehrveranstaltung lautet „Grundlagen der Materialwissenschaft“. Die Bedeutung dessen wird im Laufe des Semesters klar werden; außerdem liefert es einen Hinweis darauf, was im Zweifelsfall für die Klausur relevant ist (ich werde gelegentlich besonders betonen, wenn etwas zum Grundlegenden gehört).

Kapitel 1: Einleitung

Dieses Kapitel ist nicht klausurrelevant, liefert aber eine gute Übersicht, was (und warum) in dieser Vorlesung behandelt wird, und es hebt (hoffentlich) das Niveau des Allgemeinwissens.

Beim Lesen dieses Kapitels können Sie sich auf die Abschnitte 1.1.1, 1.1.3 und 1.2.2, die „Merkmale“-Abschnitte 1.1.4 und 1.2.4 sowie die Zusammenfassungen 1.3.1 und 1.3.2 beschränken.

Die Kernaussage dieses Kapitels steht im Abschnitt 1.1.1, es ist die Definition des Begriffs „Materialwissenschaft“ als *Naturwissenschaft von den Eigenschaften der Materialien, den (physikalischen, chemischen, wirtschaftlichen oder sonstigen) Ursachen dieser Eigenschaften, und damit der wissenschaftlich begründeten Materialauswahl, Materialherstellung und Materialanalyse für technische Anwendungen.* (Ich füge hinzu: *neuartige Anwendungen!*)

„Naturwissenschaft“ wiederum bedeutet, daß es um chemische oder physikalische Experimente und technische **Messungen** geht, die mittels mathematischer **Modelle** gedeutet und dadurch **verstanden** werden können. Diese Modelle ermöglichen zudem quantitative **Vorhersagen**, anhand derer sie durch weitere Experimente überprüft und ggfs. widerlegt werden können.

Nota bene: Ein naturwissenschaftliches Modell kann **niemals verifiziert** werden; es gibt keine „Wahrheit“ in der Naturwissenschaft. *Nur solange keine neuen experimentellen Befunde gegen sie sprechen, gelten die „Naturgesetze“!* Erst die Überprüfbarkeit anhand von Experimenten und Messungen macht aus einer Wissenschaft eine Naturwissenschaft.

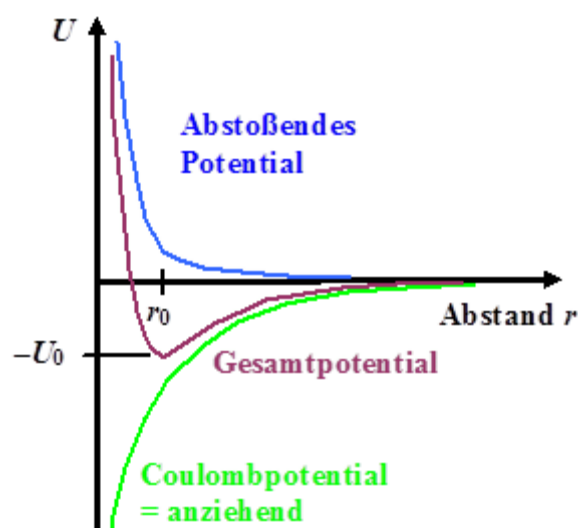
In der Wissenschaft geht es immer um die Klärung der Warum-Frage, wobei dieses „Warum“ stets nach den Ursachen fragt, d. h. nach dem „Woher“ – nicht aber nach dem „Wozu/-hin“!

Unterkapitel 2.1: Bindungspotentiale und erste Eigenschaften

2.1.1 Das Bindungspotential

Dies ist ein besonders grundlegender Abschnitt. Das betrifft nicht nur das Verständnis atomarer Bindungsverhältnisse, sondern auch die generelle Herangehensweise an die Materie; letzteres wird durch folgende Aussage ausgedrückt: *Es gibt oft keine einfachen Formeln für einfache Tatbestände. Aber: Es gibt manchmal sehr einfache Formeln oder Graphiken für sehr komplexe Situationen.*

Eine solche einfache Graphik ist die für das Bindungspotential, das sich aus einem anziehenden und einem abstoßenden Anteil zusammensetzt:



Die betragsmäßige (!) Tiefe U_0 dieses Potentialtopfes ist zugleich die Bindungsenergie. (Bitte noch mal selber nachdenken: Warum genau ist das so?)

Die zugehörige, etwas allgemeiner gehaltene modellhafte Formel sieht prinzipiell so aus (vgl. 1. Übungsblatt, Aufgabe 1):

$$f(x) = -\frac{A}{x^n} + \frac{B}{x^m}.$$

Hier bedeutet „modellhaft“, daß es bei dieser Formel nur darum geht, das grundlegende **Zusammenspiel** von anziehendem und abstoßendem Anteil wiederzugeben, ohne quantitativ exakt zu sein. (Wir werden diese Art Modellpotential auch noch quantitativ „ausschlachten“!)

Dieses modellhafte Potential ist zwar strenggenommen lediglich ein „Paarpotential“, d. h. es gilt nur für ein zweiatomiges Molekül, aber vom Prinzip her gilt das meiste dessen, was man anhand dieses Potentials lernen kann, auch für Atome in einem größeren Stück Materie.

Für Ionenkristalle läßt sich die Formel bezüglich des anziehenden Teils verallgemeinern; für sie erhält man direkt den Formelausdruck für das Coulombpotential, lediglich modifiziert um die **Madelungkonstante** α_M . Diese Konstante gibt effektiv an, um welchen Faktor ein Ion im Kristall fester gebunden ist als im Molekül.

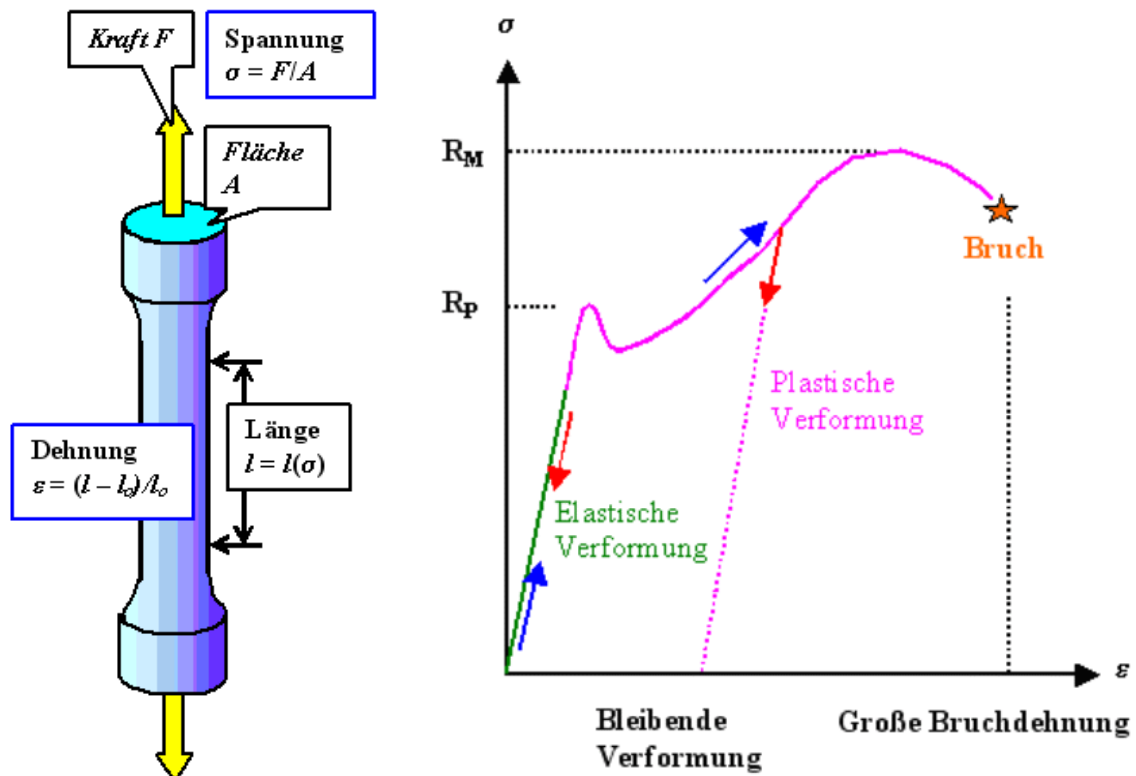
Bei der Bildung eines Ionenkristalls ist zu beachten, daß die Atome vor dem Eingehen der Bindung elektrisch neutral vorliegen. Zusätzlich zu den Energien, die mit den Bindungsverhältnissen im Kristall einhergehen, sind auch noch die Energien für den **Elektronentransfer** von einem Atom zum anderen relevant. Weil dabei das eine Atom ein Elektron abgibt, das andere aber eins aufnimmt, ist klar, daß es dabei um zwei verschiedene Energien geht – nämlich die Ionisierungsenergie und die Elektronenaffinität. Dabei ist folgender prinzipieller Unterschied zu beachten:

Die Loslösung eines Elektrons vom neutralen Atom gelingt unter Aufbringung der erforderlichen **Ionisierungsenergie** I in jedem Fall, wohingegen die Anlagerung eines zusätzlichen Elektrons nicht erzwungen werden kann. Daher ist es sinnvoll, statt dessen den umgekehrten Vorgang zu betrachten und also das bereits negativ geladene Atom als Ausgangszustand zu nehmen, dem das überzählige Elektron wieder weggenommen wird. Damit ist klar, was die **Elektronenaffinität** A ist: Es handelt sich effektiv um die Ionisierungsenergie des einfach negativ geladenen Ions. Ferner ist damit auch klar, daß die Angabe einer Elektronenaffinität in den Fällen, in denen es kein negativ geladenes Ion gibt, sinnlos ist.

2.1.2 Bindungspotentiale, Federn und Elastizitätsmodul

Auch dies ist ein besonders grundlegender Abschnitt; es geht darum, die **atomaren** Bindungskräfte mit einer **makroskopisch** meßbaren Größe (Elastizitätsmodul) in Verbindung zu bringen. Zunächst wird die zugehörige Messung vorgestellt.

Der **Zugversuch** ist das paradigmatische Experiment zur Bestimmung der grundlegenden mechanischen Eigenschaften aller Festkörper. In diesen Versuch wird eine Materialprobe der Länge l_0 so weit gestreckt, daß sie zuletzt reißt. Die zum jeweiligen Dehnungszustand (= relative Längenänderung $\varepsilon = \Delta l/l_0$, angegeben in Prozent) gehörende Kraft wird gemessen und auf die Anfangs-Querschnittsfläche der Probe normiert; letzteres nennt man die mechanische Spannung σ . (Hinweis: Die Bedeutung der Formelzeichen ε und σ hängt vom Kontext ab!)



Im linearen Anfangsbereich der Kurve verhält sich das Material vollkommen **elastisch**, d. h. es gibt **keine bleibende** Verformung. Der Proportionalitätsfaktor zwischen mech. Spannung und Dehnung (= Steigung dieser Geraden) ist der (!) Elastizitätsmodul $E := d\sigma/d\varepsilon$. Weil die Dehnung einheitenlos ist (% ist keine Maßeinheit!), wird der E-Modul in Pascal gemessen: $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$. Die für den E-Modul von Festkörpern relevante Größenordnung sind GPa.

Analog zur Federkonstante des Hooke'schen Gesetzes, die den Zusammenhang zwischen Kraft und Auslenkung angibt, gibt der E-Modul den Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung an. Der E-Modul eines Materials ist eine intrinsische Materialeigenschaft, d. h. er ist unabhängig von dessen konkreter Ausformung (Größe, Dicke, ...).

Auf ein einzelnes Atom bezogen, ist die mech. Spannung die Kraft auf das Atom geteilt durch die zum Atom gehörende Querschnittsfläche des Materials (r_0 : Atomabstand): $\sigma = F_{\text{Atom}} / r_0^2$. Daraus folgt: $E = d\sigma/d\varepsilon = (dF_{\text{Atom}}/d\varepsilon) / r_0^2$. Mit der Kettenregel ist $dF_{\text{Atom}}/d\varepsilon = (dF_{\text{Atom}}/dr) \times (dr/d\varepsilon)$. Für die Dehnung gilt im atomaren Bereich $\varepsilon = (r - r_0)/r_0$, woraus $dr/d\varepsilon = r_0$ folgt. Weil hier der Zugversuch behandelt wird, geht es um die von außen auf das Atom ausgeübte Kraft $F_{\text{Atom}} = dU/dr$ (ohne Minuszeichen!). Insgesamt ist $E = d\sigma/d\varepsilon = (1/r_0^2) (dF_{\text{Atom}}/d\varepsilon) = (1/r_0^2) (dF_{\text{Atom}}/dr) (dr/d\varepsilon) = (1/r_0^2) (d^2U/dr^2) r_0 = (1/r_0) (d^2U/dr^2)$, d. h. der **E-Modul** ergibt sich aus der **Krümmung** des atomaren Bindungspotentials in dessen **Minimum**.

Verwendet man für $U(r)$ das Modellpotential aus Abschnitt 2.1.1, erhält man $E = n m U_0 / r_0^3$ (siehe Übungsaufgabe). Weil die Schmelztemperatur T_m proportional zur Bindungsenergie U_0 ist, bedeutet dies eine Proportionalität zwischen E und T_m . Trägt man die unabhängig voneinander gemessenen Werte gegeneinander auf, findet man einen solchen Trend (vgl. https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/ammat/mw_for_et/kap_2/illustr/i2_1_1.html).