

# Schmelzen und Glasbildung von Einkomponenten-Systemen

Mat.-wiss. u. Werkstofftech. (Materials Science and Engineering Technology) **36** (7), 313-319 (2005)

Hans Jürgen Hoffmann

Institut für Werkstoffwissenschaften und -technologien : Glaswerkstoffe

Technische Universität Berlin

Englische Strasse 20, D-10587 Berlin

Hoffmann.Glas@TU-Berlin.de

## Zusammenfassung

Das Schmelzen der festen chemischen Elemente wurde kürzlich durch elektronische Übergänge erklärt. Bei solchen Übergängen in höhere Energieniveaus werden die Wellenfunktionen und die räumliche Ladungsverteilung geändert. Da unterschiedliche elektronische Zustände besetzt werden und somit sich die Ladungsverteilung zufällig mit der Zeit ändert, werden die Rumpf-Ionen auf neue Plätze gezogen. Wenn die Kräfte hinreichend stark sind und die Rumpf-Ionen innerhalb der Lebensdauer der angeregten Zustände auf ihre neuen Plätze relaxieren, ändert sich die Anordnung ständig und es liegt eine Schmelze vor. Diese Betrachtung wird auf Verbindungen als Einkomponenten-Systeme erweitert.

Die Schmelzentropie und die spezifischen Wärmekapazitäten nahe der Schmelztemperatur wurden auf die Anzahl an Atomen der betreffenden Verbindungen normiert. Die Wärmekapazitäten sind grösser als  $3R$ , dem klassischen Wert für Gitterschwingungen, und zeigen ebenso wie die Schmelzentropien bei speziellen Werten Häufungspunkte. Dies scheint die Vorstellung zu stützen, dass Schmelzen durch elektronische Übergänge in Energieniveaus in vergleichsweise schmalen Intervallen hervorgerufen wird.

Die Verteilung der elektronischen Energieniveaus sind in Schmelze und Kristall unterschiedlich. Wenn die Kräfte der elektronischen Ladungsverteilung in Zuständen mit niedriger Energie zu schwach sind, um während der Kühlung die Rumpf-Ionen auf reguläre Gitterplätze zu bringen, wird der ungeordnete Zustand eingefroren und die Transformation in ein Glas findet statt. Solch ein Übergang wird begünstigt, wenn zwischen Nachbar-Ionen hinreichend starke gerichtete Bindungen vorhanden sind und die Schmelzentropie pro Teilchen niedrig ist.

**Schlüsselworte:** Schmelzen, Schmelzentropie, spezifische Wärmekapazität, Glasbildung, elektronische Übergänge