Kap. 7: Materialklassen



7. Kondensierte Materie vs. Festkörper (1)

Aggregatzustände:

- 1. Festkörper: formstabil (bis zur Festigkeitsgrenze) und volumenstabil feste Anordnung der Atome (falls kristallin → regelmäßige Anordnung als Gitter) Atome sind dicht gepackt, sehr wenig kompressibel.
- 2. Flüssigkeiten: nicht formstabil, aber volumenstabil (V ≈ const) keine Fernordnung; Teilchen gegeneinander frei verschiebbar. Teilchen dicht gepackt, Flüssigkeiten nur schwach kompressibel, d.h. Flüssigkeiten widerstehen Kräften senkrecht zur Oberfläche, aber nicht Scherkräften (= Kräften parallel zur Oberfläche).
- 3. Gase: nicht formstabil und nur gering volumenstabil keine Ordnung; Teilchen erfüllen den verfügbaren Raum Abstand zwischen Teilchen ist groß (→ komprimierbar),

Festkörper & Flüssigkeiten: "kondensierte Materie"

Flüssigkeiten & Gase: "Fluide"



7. Flüssigkeiten (2)

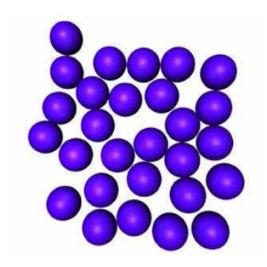


Figure 6.3: Cartoon of a Liquid. In liquids, molecules are not in an ordered configuration and are free to move around (i.e, the liquid can flow). However, the liquid molecules do attract each other and at any moment in time you can typically define neighbors.

Eigenschaften:

- statistische Bewegung der Atome/Moleküle
- mittlere freie Weglänge in der Größenordnung der Teilchendurchmesser
- keine Fernordnung, aber Nahordnung
- quantifiziert durch radiale Verteilungsfunktion der Atome



7. Klassifizierung von Materialien (3)

Strukturmaterialien: Konstruktionswerkstoffe, Fokus auf mechanische Eigenschaften (Dichte, Härte, Beständigkeit)

Funktionsmaterialien: Nutzung / Einstellung spezieller Merkmale Fokus auf elektrische, magnetische, optische, chemische,... Eigenschaften

Materialklasse	Struktur	Kommentar anorganisch, gute Leiter, verformbar	
Metalle	kristallin		
Keramiken	kristallin	anorganisch, bei hohen Temperaturen hergestellt, schlechte Leiter, brüchig	
Polymere	amorph, teilkristallin	organisch + anorganisch, enorme Bandbreite von Eig.	
Gläser	amorph	keine Kristallisation, Existenz Glasübergangstemperatur	
Flüssigkristalle	teilgeordnet	komplexere Ordnung	
Quasikristalle	geordnet	nicht periodisch, dennoch langreichweitig geordnet	
Nanokomposite	geordnet	komplexere Ordnung, reichhaltige Phasendiagramme	

Rolle von Defekten?

Strukturfehler bewirken

- quantitative Änderungen
- qualitative
 Änderungen

Beispiele:

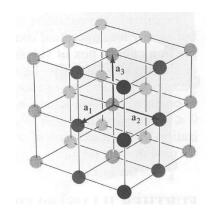
- Versetzungen in Metallen
- Farbzentren in Gläsern
- Dotierung in Halbleitern



7. Kristalle (4)

Bsp.: Eis, Salze, Metalle

- periodische Anordnung der Atome:
 Fernordnung der Atompositionen → Kristallgitter
- anisotrop (verschiedene Richtungen nicht äquivalent)

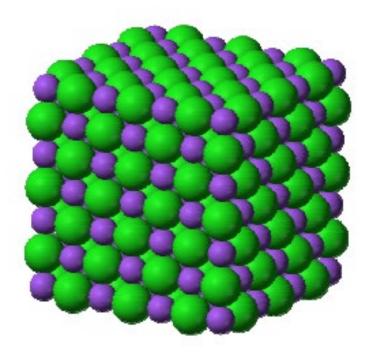








7. Kristalle (5)



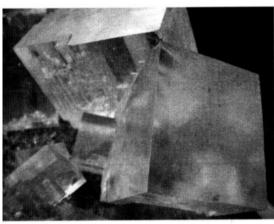


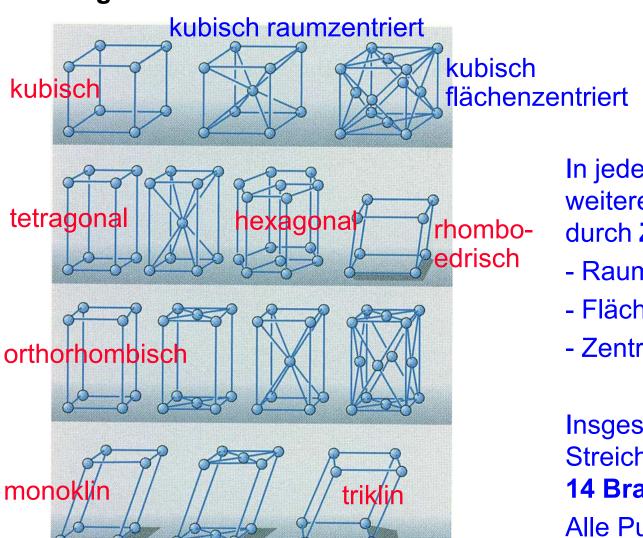
Fig. 7.1: Left: Small units reproduced periodically to form a crystal. This particular figure depicts NaCl (table salt), with the larger spheres being Cl⁻ ions and the smaller spheres being Na⁺ ions. Right: The macroscopic morphology of a crystal often will reflect the underlying microscopic structure. These are large crystals of salt (also known as halite). Photograph by Piotr Włodarczyk, used by kind permission.

Kristalle (periodische, deterministische Fernordnung)



7. Kristalle (6)

Kristallaufbau durch lückenloses Aneinanderreihen von Elementarzellen Mögliche Kristallstrukturen in 3 Dimensionen:



Es gibt **7 Achsensysteme** (Kristallsysteme mit unterschiedlicher Symmetrie).

In jedem Achsensystem können weitere Gittertypen erzeugt werden durch **Zentrierungen**:

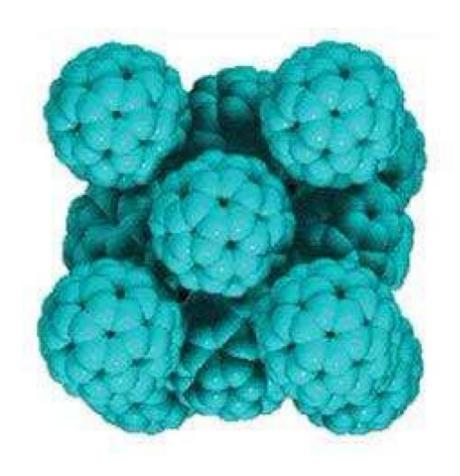
- Raumzentrierung
- Flächenzentrierung
- Zentrierung nur der Basisfläche

Insgesamt ergeben sich nach Streichung von Doppelzählungen 14 Bravais-Gitter (zentrierte Gitter).

Alle Punkte sind äquivalent.



7. Kristalle (7)



Einheitszelle eines molekularen Kristalls aus C₆₀-Fullerenen (Buckyballs):

fcc-Struktur mit komplexen Bausteinen (s. Kap. 11)



7. Amorphe Festkörper (8)

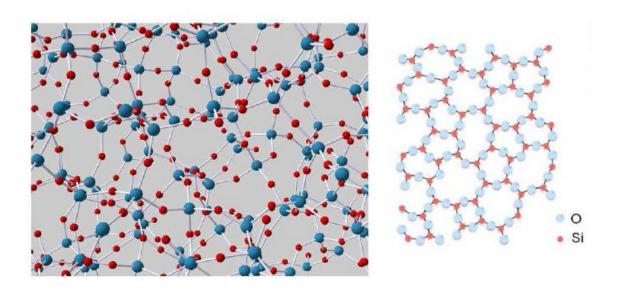


Figure 6.4: Cartoon of Amorphous Solid: Silica (SiO₂) can be an amorphous solid, or a glass (as well as being crystalline quartz). Left is a three dimensional picture, and right is a two dimensional cartoon. Here the atoms are disordered, but are bonded together and cannot flow.



7. Amorphe Festkörper (9)

Bsp.: Glas, Wachs, Pech

- unregelmäßige Anordnung, keine Fernordnung
- nur Abstand zwischen Nachbaratomen (Dichte) im Mittel konstant
- isotrop (keine Richtung ausgezeichnet)
- metastabil (entstehen oft durch Abschrecken,

d.h. Kristallisation kinetisch unterdrückt)

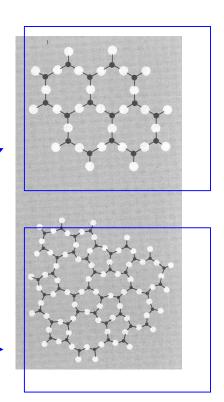
- Übergang fest-flüssig nicht scharf

Wichtiger Unterschied zwischen Flüssigkeiten und amorphen Festkörpern:

Häufigkeit der atomaren Platzwechsel

Kristall: periodische Fernordnung

Netzwerk mit gut definierter Nahordnung (häufig vorgegeben durch chemische Bindungslängen und -winkel), aber ohne Fernordnung.





7. Gläser (10)

	Table 6.3	Some silicate glasses	1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 -
Name	Typical composition	Important property	Principal uses
Soda glass	15 % Na ₂ O: 85 % SiO ₂	Cheap	Window glazing
Soda-lime glass	72 % SiO ₂ : 14 % Na ₂ O: 14 % CaO	Cheap	Window glazing
Borosilicate (Pyrex®)	80 % SiO ₂ : 13 % B ₂ O ₃ : 7 % Na ₂ O	Low coefficient of expansion	Cooking ware, laboratory ware
Crown glass	9 % Na ₂ O: 11 % K ₂ O: 5 % CaO: 75 % SiO ₂	Low refractive index	Optical components
Flint glass	45 % PbO: 55 % SiO2	High refractive index	Optical components, 'crystal' glass
Lead glass	Up to 80 % PbO: SiO2	Absorbs radiation	Radiation shielding
Silica	100 % SiO ₂	Very low coefficient of thermal expansion	Optical components, laboratory ware, optical fibre

Typ. Vertreter: Natron-Kalk-Glas

- Hauptbestandteil SiO₂
- Netzwerk von Silizium-Oxid-Tetraedern

Gläser sind Spezialfall amorpher Stoffe: ungewöhnliche + extrem temperaturabhängige Viskosität



7. Gläser (11)

Table 6.4 Glass viscosity

Glass condition	η/Pa s	Comment	Temperature/°C for soda-lime glass
Melting temperature	10	Glass becomes fluid and a homogeneous melt is achievable	1450
Working point	10^{3}	Glass is easily deformed but retains its shape	1000
Softening point	$10^{6.6}$	Glass deforms under its own weight	700
Annealing point	10 ¹²	Residual stress in a thin plate can be removed in 15–20 minutes	550
Strain point	10 ^{13.5}	Fracture-plastic deformation boundary (see Section 10.1.10)	500

Note: $\eta = \text{viscosity}$. All figures given in this table are approximate.

- Viskosität verändert sich exponentiell im nutzbaren Bereich
- erreichbares Temperaturregime mit leichter Deformierbarkeit, Form bleibt nach Abkühlung erhalten (Glasbläserei)
- auch heute noch nicht vollständig verstanden



7. Gläser (12)

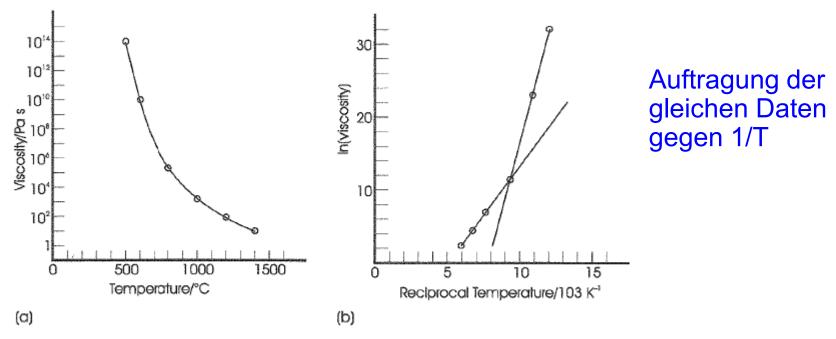


Figure 6.18 (a) Viscosity versus temperature for a typical soda-lime glass and (b) plot of ln (viscosity) versus reciprocal temperature for the same glass

Gläser:

- Viskosität extrem temperaturabhängig
- Nicht-Arrhenius-Verhalten der Viskosität
- Existenz einer Übergangstemperatur: "Glasübergang"

Rechnung: Nicht-Arrhenius-Verhalten und Vogel-Fulcher-Gesetz



- Klassisches Arrhenius-Verhalten: thermische Aktivierung von Prozessen mit Boltzmann-Faktor
- - - a.B. Diffusion: D = Do · e-E/KBT temperaturabh. Diffusionskonstante
 - mit E = charakterist. Energie of Prozess, (E>0)a.B. Energiebarriere
 - Signatur des Arrhenius-Verhaltens im Experiment:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{E}{k_0 T}$$

Viskosität
$$n = n_0 \cdot e^{E/k_BT}$$
 mit $E > 0$ $(n \to \infty f. T \to 0)$
entsprechend: Auftragung In n gegen 1/T ergibt Gerade $f. E = const$

7. Gläser (13)

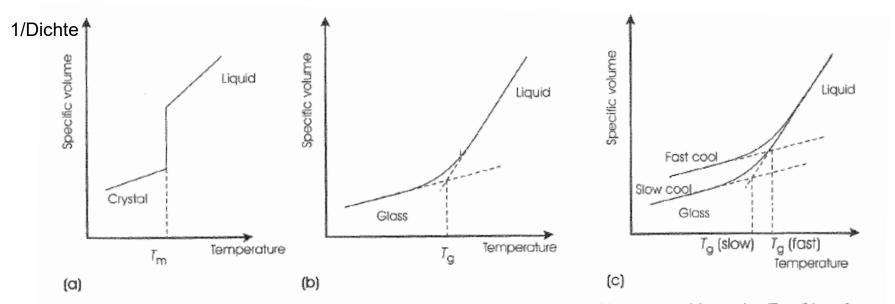


Figure 6.17 Specific volume versus temperature curves: (a) a crystalline solid with a melting point $T_{\rm m}$; (b) a glass, with a glass transition temperature $T_{\rm g}$; and (c) the effects of cooling rate on glass transition temperature

- Glasübergang trennt verschiedene Regimes
- keine Kristallisation (auch nicht nach langer Zeit)
- kein regulärer thermodynamischer Phasenübergang ("Nicht-ergodischer Phasenübergang")



7. Flüssigkristalle (14)

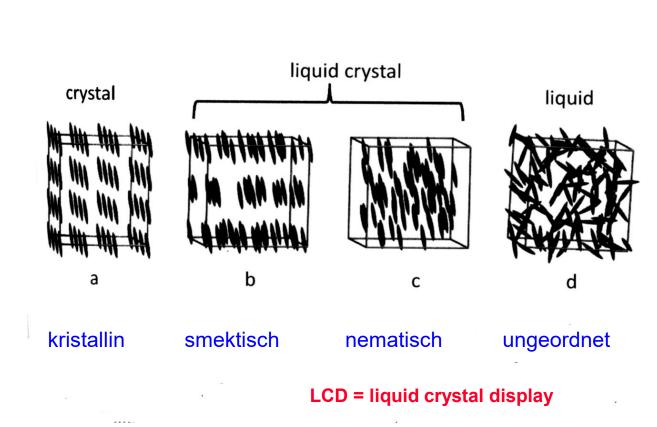


Fig. 7.5 Cartoon of liquid crystals. Liquid crystals have some of the properties of a solid and some of the properties of a liquid. (a) The far left is a crystal of molecules—all the molecules are positionally ordered and all are oriented in the same direction. (b) In the middle left picture the molecules retain their orientation, and retain some of their positional order—they group into discrete layers—thus being "crystalline" in the vertical direction. But within each layer, they are disordered and even can flow within the layer (this is known as a smectic-C phase). (c) In this figure, the positional order is lost, the positions of the molecules are random, but the molecules all retain their orientations (this is known as a nematic phase). (d) On the far right, the system is a true liquid, there is no positional order or orientational order.

Sonderfall Flüssigkristalle: intermediäre Ordnungsphänomene bzgl. Position + Orientierung



7. Quasikristalle (15)

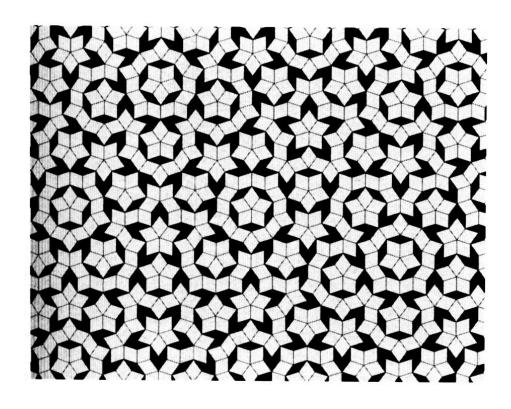


Fig. 7.6 This quasicrystal, known as Penrose tiling, can be assembled by following a simple set of rules. While the pattern looks regular it is actually non-periodic as it never repeats.

Beispiel: Fibonacci-Multilayer

Quasikristalle (nichtperiodische, deterministische Fernordnung) möglich in allen Dimensionen



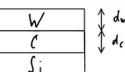
Quasikristalle: aperiodische, deterministische Fernordnung mit

- · systematischer, aber nicht vollständiger Raumausfüllung in 3D
- entsprechender Parkettierung in 2D
- entsprechender Linienbelegung in 1D

Beispiel in 1D: Multilayer

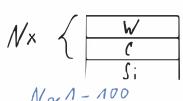
a) periodischer Multilayer: periodisches Schichtsystem (künstlicher 1D-Kristall, da Periodizität nur in Wachstumsrichtung)

Doppelschicht auf Si-Substrat typ. Schichtdicken 1 - 10 nm





Übergang zu Übergitter durch N-fache Wdh. der Doppelschicht (Baustein A)



$$N \times \left\{ \begin{array}{c} W \\ C \\ S \end{array} \right\} = N \times \left\{ \begin{array}{c} A \\ S \end{array} \right\} \int_{S} d_{A} = d_{w} + d_{c}$$

b) aperiodischer Multilayer, z.B. realisierbar durch Eibonacci-Folge

Fibonacci-Folge:

$$0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, \dots$$
 $a_{n+1} = a_n + a_{n-1}$ Verankerung $a_1 = 0, a_2 = 1$

Übertragung auf Schichtsysteme:

steme:

$$S_{n+1} = S_n + S_{n-1} \quad Verankerung + S_1 = A_1 + S_2 = A_B$$

$$A = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 + A_5$$

$$S_1 = A$$
, $S_2 = AE$

$$A \downarrow d_A$$

$$B \downarrow d_B$$

Vorschrift f. Schichtabfolge des Fibonacci-Multilayers der

Generation n+1

Sequenz:

A

B

usw.

Selbstähnlichkeit durch rekursive Aufbauvorschrift

7. Polymere (16)

Natürliche Polymere (Biopolymere): Gummi

Zellulose

DNA

...

Künstliche Polymere (Kunststoffe): Polyethlyen (PE)

Polypropylen (PP)

Polymethylacrylat (PMMA)
Polyethylenterephthalat (PET)

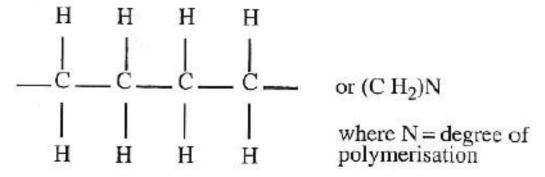
...



7. Polymere (17)

Massenkunststoff PE

Polyethylene



$$\begin{pmatrix}
H & H \\
-C & -C \\
H & H
\end{pmatrix}_{n}$$

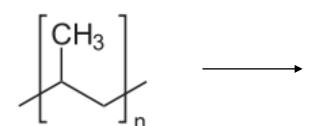
Polymer durch Verkettung von sogenannten Monomeren

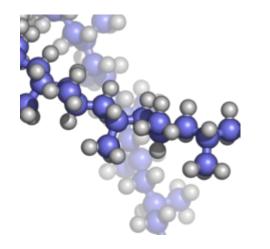
- komplexe Verkettungsformen möglich
- ausserdem: Verkettung in 3D!



7. Polymere (18)

Massenkunststoff PP (Polypropylen)





Polymer durch Verkettung von Monomeren







7. Polymere (19)

Massenkunststoff PMMA ("Plexiglas", "Acrylglas")

Polymethyl methacrylate

$$\begin{pmatrix}
CH_{3} \\
I \\
CH_{2}-C \\
C = O
\end{pmatrix}_{N}$$

$$O CH_{3}$$

PMMA or Perspex (ICI trade name)

Polymer durch Verkettung von Monomeren



7. Polymere (20)

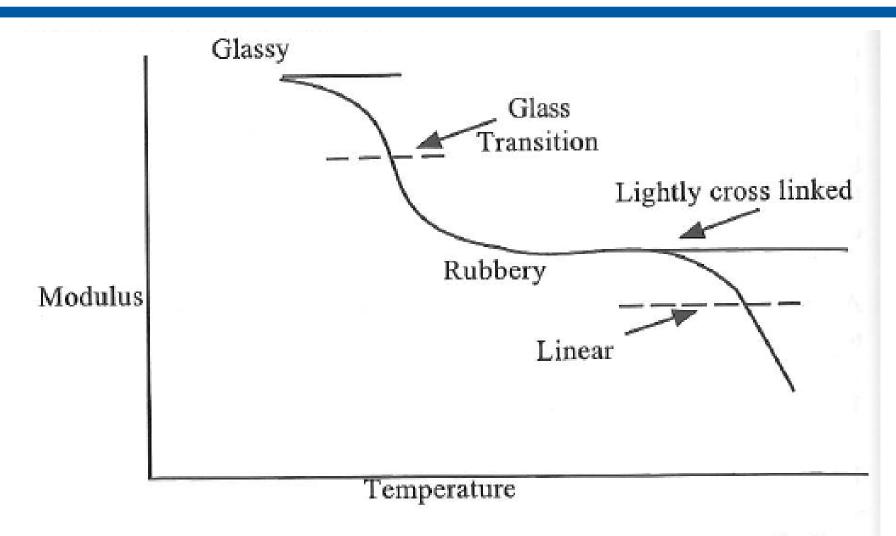
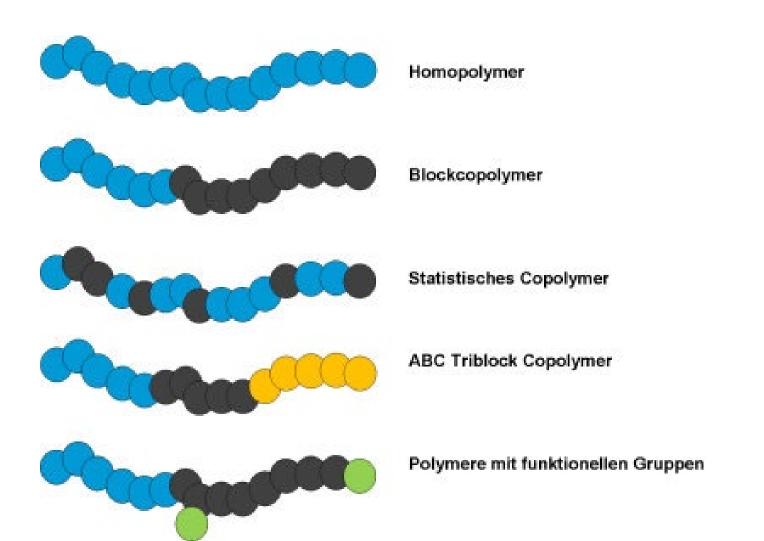


Figure 1.6 Modulus temperature plot depicting the different states of an idealized polymer.



7. Nanokomposite (21)

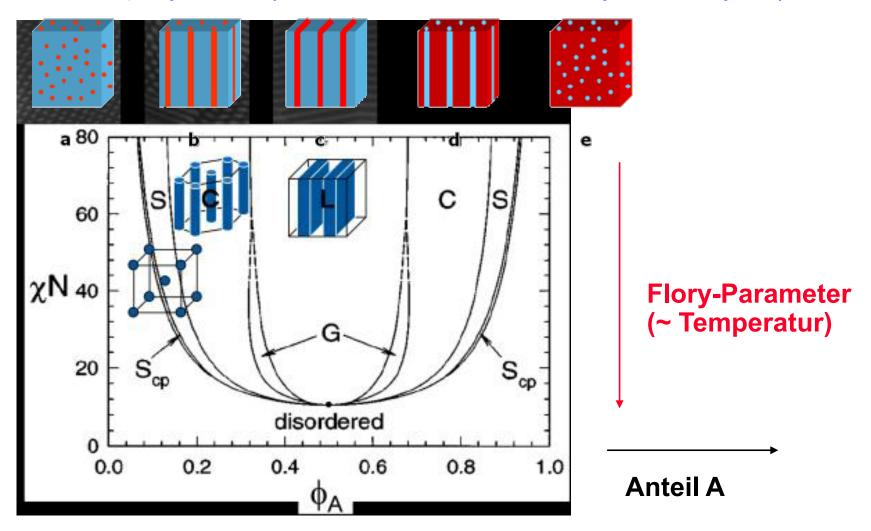
Noch mehr Freiheitsgrade: Blockcopolymere (Nanotechnologie)





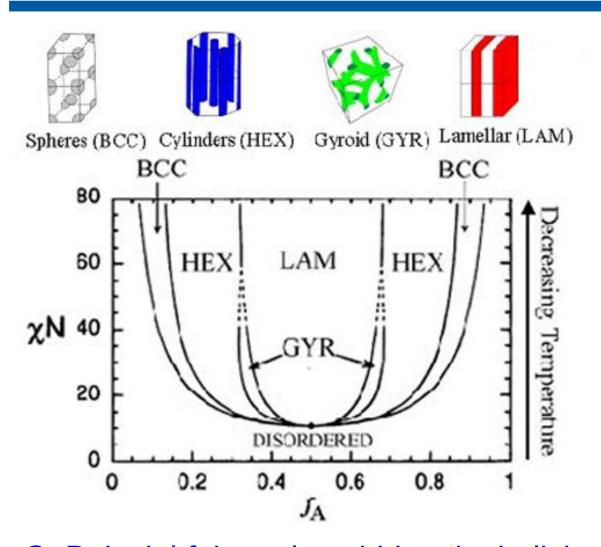
7. Nanokomposite (22)

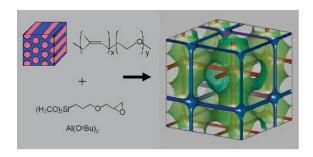
Komplexe Phasendiagramme mit Mikrophasen-Separation f. Di-Blockcopolymere (berechenbar in der Polymer-Physik)





7. Nanokomposite (23)





The Plumber's Nightmare: A New Morphology in Block Copolymer-Ceramic Nanocomposites and Mesoporous Aluminosilicates

Adam C. Finnefrock, Ralph Ulrich, Gilman E. S. Toombes, Sol M. Gruner, and Ulrich Wiesner

View Author Information ∨

© Cite this: *J. Am. Chem. Soc.* 2003, 125, 43, 13084–13093 Publication Date: October 1, 2003 ∨

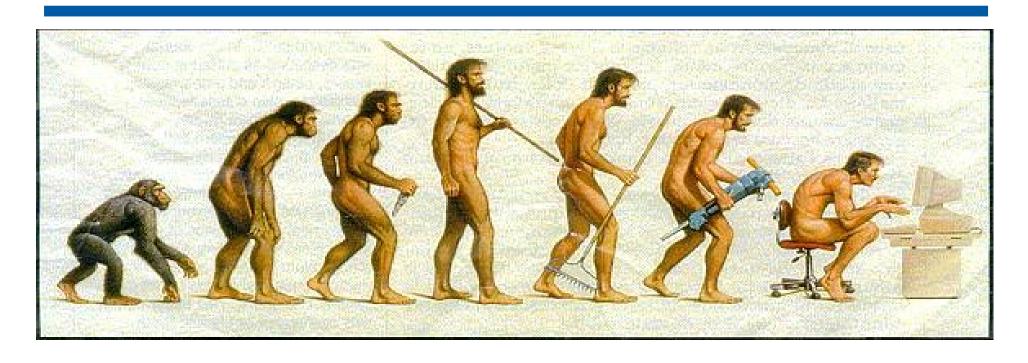
Publication Date: October 1, 2003 ~ https://doi.org/10.1021/ja0355170 Copyright © 2003 American Chemical Society Article Views Altmetric Citatio
2056 17 11

LEARN ABOUT THESE METRICS

G: Beispiel f. komplexe bi-kontinuierliche Struktur "plumber's nightmare"



7. Materialklassen (24)



Kulturepochen der Menschheit werden nach ihren Werkstoffen benannt:

Steinzeit - Bronzezeit - Eisenzeit - später evtl. Siliziumzeit (?)

