

*Erstens* konnte die Wachstumstemperatur der Kristalle nur auf  $\pm 20^{\circ}\text{C}$  bestimmt und eingehalten werden;

*zweitens* kann die in Abb. 2 b wiedergegebene Abhängigkeit der Gitterkonstanten des  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  von seinem Zinngehalt mit einem kleinen systematischen Fehler behaftet sein.

Die in Abb. 2 ermittelte Temperaturabhängigkeit der zinnreichen Phasengrenze des  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  gilt mit Sicherheit auch für das Diffusions- $\text{Nb}_3\text{Sn}$ , für dessen Wachstum der gleiche Mechanismus verantwortlich ist. Es liegt nun nahe, die Stromtragfähigkeit im supraleit-

den Zustand oder den Kim-Hempstead-Parameter  $\alpha_c$  des Diffusions- $\text{Nb}_3\text{Sn}$ , wie er für verschiedene Diffusionstemperaturen von COLES und Mitarbeiter<sup>5</sup> an Sinterproben ermittelt worden ist, mit der von uns gefundenen Konzentrationsabhängigkeit der Phasengrenze zu vergleichen. Dabei zeigt sich eine erstaunlich gute Übereinstimmung der Maxima beider Kurven in der Gegend von  $1000^{\circ}\text{C}$ . Offenbar hat u. a. die Temperatur, bei der das Diffusions- $\text{Nb}_3\text{Sn}$  hergestellt wird, deswegen einen Einfluß auf die Stromtragfähigkeit, weil sie die Zusammensetzung des  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  beeinflußt.

<sup>5</sup> G. W. COLES, J. M. CORSAN, A. BUXTON u. B. LEWIS, J. Less Comm. Met. **8**, 402 [1965]. Die Temperaturabhängigkeit des  $\alpha_c$  ist in Abb. 2 d eingetragen worden.

## Verfahren zur Klassifizierung einatomiger Flüssigkeiten \*

H. RUPPERSBERG \*\*

Institut für Metallphysik und Metallkunde der Universität des Saarlandes, Saarbrücken

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1034—1035 [1969]; eingegangen am 2. Mai 1969)

### Classification of Monoatomic Liquids

A method is described by which monoatomic liquids may be classified with respect to their structure. The method is based on the most probable distance of nearest neighbours  $r_1$  and on the macroscopic density.

From this classification it may be decided whether published  $r_1$ -data are probably correct or not. Furthermore evidence has been found that many liquid metals have the same structure. The alkali metals are closer packed than the liquid rare gases less dense.

In einer früheren Arbeit<sup>1</sup> wurde gezeigt, daß einige Metallschmelzen beim Schmelzpunkt in der strukturempfindlichen Größe  $r_1^3 \varrho_0$  übereinstimmen.  $r_1$  ist der häufigste Abstand benachbarter Atome und wird abgelesen aus der mit Beugungsexperimenten bestimmten Atomverteilungskurve  $\{\text{AVK} = 4\pi r^2 [g(r) + \varrho_0]\}$ .  $\varrho_0$  ist die mittlere Atomzahl pro  $\text{\AA}^3$  und wird aus der makroskopischen Dichte errechnet. Die „reduzierte Dichte“  $\varrho_0' = r_1^3 \varrho_0$  ist demnach gleich der mittleren Atomzahl in einem Würfel mit der Kantenlänge  $r_1$ .

Für die beiden dichtesten Kugelpackungen hat  $\varrho_0'$  einen Wert von  $1/2$  und für das krz. Gitter einen Wert von  $\frac{4}{3} \cdot \sqrt[3]{3}$ . Wenn zwei Substanzen die gleiche Struktur haben, dann stimmen sie in  $\varrho_0'$  überein. Das umgekehrte trifft, wie das Beispiel der dichtesten Kugelpackungen zeigt, nicht notwendigerweise zu.

An Hand der  $\varrho_0'$ -Werte der Flüssigkeiten kann geprüft werden, ob diese sich in sinnvoller Weise in Klassen einteilen lassen. Die weitere Aufgabe würde dann

darin bestehen, individuelle Unterschiede zwischen den reduzierten AVK (vgl. RUPPERSBERG<sup>1</sup>) der Flüssigkeiten einer Klasse zu interpretieren. Es sollte möglich sein, ebenso wie bei der festen Phase und im Vergleich mit dieser, zu erkennen, welche Eigenschaften der AVK strukturbedingt sind. Man käme so einer Lösung der noch immer ungeklärten Frage nach der Struktur der Schmelzen näher.

Wegen der mangelnden Genauigkeit der AVK ist an eine Auswertung, so wie sie vorstehend beschrieben wurde, noch nicht zu denken. Es ergibt sich aus diesen Überlegungen jedoch eine Zielsetzung für neue Experimente. Zunächst einmal sollten die Dichte- und  $r_1$ -Werte derjenigen Substanzen überprüft werden, deren  $\varrho_0'$  stark von dem Wert vergleichbarer Stoffe abweicht.  $r_1$ -Werte, die zu einem  $\varrho_0'$  größer als 1,41 führen, sind sicherlich falsch. Derartige Werte werden in der Literatur für Li, Na, Mg, In und Zn angeführt.

In der Tabelle sind die neueren Werte für  $\varrho_0$  und  $\varrho_0'$  aller bisher untersuchter Metalle und Edelgase angegeben. Die Werte wurden bei Temperaturen dicht oberhalb vom Schmelzpunkt bzw. beim Tripelpunkt bestimmt.  $\varrho_0$  der Metalle wurde aus einer von WILSON<sup>2</sup> mitgeteilten Tabelle errechnet.  $\varrho_0'$  wurde aus den nach 1960 mitgeteilten  $r_1$ -Werten ermittelt und ist jeweils in chronologischer Reihenfolge aufgeführt. Für Substanzen, die von den gleichen Autoren mehrmals untersucht wurden, sind nur deren jüngsten Ergebnisse angegeben. Häufig werden  $r_1$ -Werte nicht für die eingangs angeführte AVK, sondern für Funktionen angegeben, die proportional zu  $r^2 g(r)$ ,  $r g(r)$  oder  $g(r)$  sind. Für eine typische AVK, mit 9 nächsten Nachbarn unter dem symmetrischen Teil des ersten Maximums, dessen Schwankungsquadrat  $0,7 r_1^2 \cdot 10^{-2}$  beträgt und bei einem  $\varrho_0'$  von 1,20, liegt das erste Maximum in den angeführten Funktionen bei einem um 0,5, 1 und 1,5% kleineren Abstandswert. Soweit nötig, wurde mit diesen Zahlen korrigiert.

<sup>1</sup> H. RUPPERSBERG, Rev. Intern. Haute Temper. Refract. **4**, 113 [1967].

<sup>2</sup> J. R. WILSON, Met. Rev. **10**, 381 [1965].

\* Teil einer Habilitationsschrift, Saarbrücken.

\*\* Sonderdruckanforderungen erbeten an: H. Ruppertsberg, Institut für Metallphysik und Metallkunde der Universität des Saarlandes, Saarbrücken.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Substanz	$\varrho_0 \cdot 10^4$	$\varrho'_0 = r_1^3 \varrho_0$
A1, A3		$\sqrt[3]{2} = 1,41$
Gitter		
A2		$\sqrt[3]{3} = 1,30$
Gitter		
Li	440	1,37 <sup>(191)</sup>
Na	244	1,35 <sup>(409)</sup>
K	128	1,41 <sup>(409)</sup>
Rb	104	1,28 <sup>(191)</sup>
Cs	83	1,25 <sup>(191)</sup>
Cu	756	1,20 <sup>(470)</sup>
Ag	520	1,22 <sup>(416)</sup>
Au	524	1,22 <sup>(416)</sup>
Mg	394	1,30 <sup>(590)</sup>
Zn	605	1,06 <sup>8</sup>
Cd	428	1,20 <sup>7</sup>
Hg	406	1,15 <sup>(416)</sup>
		1,13 <sup>(332)</sup>
		1,16 <sup>(577)</sup>
		1,13 <sup>(286)</sup>
		1,16 <sup>(40)</sup>
Al	529	1,21 <sup>(474)</sup>
Ga	521	1,23 <sup>(455)</sup>
In	368	1,16 <sup>13</sup>
Tl	334	1,20 <sup>(240)</sup>
Sn	353	1,13 <sup>(44)</sup>
		1,23 <sup>(170)</sup>
		1,13 <sup>(577)</sup>
		1,11 <sup>(449)</sup>
Pb	308	1,20 <sup>(495)</sup>
Sb	320	0,74 <sup>(107)</sup>
Bi	288	1,08 <sup>(495)</sup>
Fe	756	1,21 <sup>(473)</sup>
He		stark, aber nicht eindeutig p- und T-abhängig <sup>17</sup>
Ne	372 <sup>18</sup>	1,19 <sup>19</sup>
Ar	215 <sup>18</sup>	1,16 <sup>(193)</sup>
Kr	176	1,15 <sup>(13°)</sup> oberhalb vom Tripelpunkt <sup>(82)</sup>
Xe	141	1,18 <sup>21</sup>

Tab. 1. Atomdichte und reduzierte Atomdichte von Flüssigkeiten. Die in Klammern gesetzten Literaturhinweise finden sich bei STEEB<sup>6</sup> unter der angegebenen Ziffer.

Aus der Tabelle ist zu ersehen, daß die reduzierten Dichten der „echten“ Metalle, mit Ausnahme der Alkalimetalle und Magnesium, zwischen 1,20 und 1,25 liegen. Zieht man die Ungenauigkeit in den zugrunde liegenden Werten in Betracht, so scheint mit dem erwähnten Vorbehalt die Annahme gerechtfertigt, daß diese Schmelzen in der Struktur übereinstimmen. Ihre Packungsdichte ist um 15% kleiner als die der dichtesten Kugelpackung. Wobei die Packungsdichte hier, wie bei vergleichbaren Untersuchungen an der festen

Phase, auf den häufigsten Abstand nächster Nachbarn und nicht, wie bei der in letzter Zeit häufig angewandten Methode von ASHCROFT und LEKNER<sup>3</sup> auf den hard-core-Durchmesser bezogen ist. Die große Abnahme der Packungsdichte beim Schmelzen kommt dadurch zustande, daß sich dabei sowohl  $r_1$  als auch  $\varrho_0$  verringern.

Die flüssigen Alkalimetalle und auch Magnesium scheinen, das ist überraschend, dichter gepackt zu sein. Ob diese Substanzen unter den Metallschmelzen eine Sonderstellung einnehmen oder ob bei den hier natürlich besonders schwierigen Untersuchungen ein systematischer Fehler aufgetreten ist, wird die Zukunft zeigen. Es muß hierzu angemerkt werden, daß mehrere Fehlerquellen erhöhte  $r_1$ -Werte verursachen und daß erfahrungsgemäß kleinere  $r_1$ -Werte eher richtig sind. Die flüssigen Edelgase bilden offenbar eine weitere Klasse mit einem  $\varrho'_0$  zwischen 1,15 und 1,20.

Über die Temperaturabhängigkeit der AVK von Flüssigkeiten gibt es nur wenige Untersuchungen. Es dürfte jedoch gesichert sein, daß sowohl  $\varrho_0$  als auch  $r_1$  mit steigender Temperatur kleiner werden. Das steht im Gegensatz zum Verhalten in der festen Phase; dort bleibt  $\varrho_0$ , solange keine Phasenumwandlung eintritt, praktisch konstant. Nach KLEIN und RUPPERSBERG<sup>4</sup> nähert sich  $\varrho'_0$  mehrerer Schmelzen bei einer Unterkühlung dem Wert der dichtesten Kugelpackung. Die flüssigen Alkalimetalle können demnach als relativ kalte Flüssigkeiten, die flüssigen Edelgase als relativ heiße Flüssigkeiten aufgefaßt werden.

Von PASKIN<sup>5</sup> wurde die gute Übereinstimmung der Höhe vom ersten Maximum in reduzierten Paarverteilungsfunktionen  $g(r/r_1)/\varrho_0 + 1$  von Ar, Na, Rb und Cs als Gesetz korrespondierender Zustände aufgefaßt. Unsere Untersuchungen zeigen, daß Argon und die Alkalimetalle im flüssigen Zustand beim Tripelpunkt nicht die gleiche Struktur haben, sofern die gleichen Maßstäbe wie in der festen Phase angelegt werden. Es ist allerdings noch keineswegs bewiesen, inwieweit man das darf und inwieweit die Suche nach einer Struktur überhaupt das Verständnis der flüssigen Phase zu vertiefen vermag.

Der Autor dankt Herrn Professor Dr. H. J. SEEMANN für die wohlwollende Förderung. Wir danken dem Institut de Recherches de la Siderurgie (IRSID) in St. Germain-en-Laye für finanzielle Unterstützung. Herrn Professor Dr. C. N. J. WAGNER sei für die Erlaubnis gedankt, seine noch nicht veröffentlichten Ergebnisse zu verwerten.

<sup>13</sup> R. LEONHARDT, H. RICHTER u. W. ROSSTEUTSCHER, Z. Phys. **165**, 121 [1961].

<sup>14</sup> H. KREBS, H. HERMSDORF, H. THURN, H. WELTE u. L. WINKLER, Z. Naturforsch. **23a**, 491 [1968].

<sup>15</sup> H. RICHTER u. H. OEHME, Z. Naturforsch. **22a**, 655 [1967].

<sup>16</sup> S. P. ISHERWOOD u. B. R. ORTON, Phil. Mag. **17**, 561 [1968].

<sup>17</sup> D. G. HENSHAW, Phys. Rev. **119**, 14, 22 [1960].

<sup>18</sup> V. J. JOHNSON, Properties of Materials at Low Temperature (I), Pergamon Press, London 1961.

<sup>19</sup> D. STIRPE u. C. W. TOMPSON, J. Chem. Phys. **36**, 392 [1962].

<sup>20</sup> B. A. DASANNACHARYA u. K. R. RAO, Phys. Rev. **137 A**, 417 [1965].

<sup>21</sup> R. W. HARRIS u. G. T. CLAYTON, Phys. Rev. **153**, 229 [1967].

- <sup>3</sup> N. W. ASHCROFT u. J. LEKNER, Phys. Rev. **145**, 83 [1966].  
<sup>4</sup> F. K. KLEIN u. H. RUPPERSBERG, Adv. Phys. **16**, 271 [1967].  
<sup>5</sup> A. PASKIN, Adv. Phys. **16**, 223 [1967].  
<sup>6</sup> S. STEEB, Fortschr. chem. Forsch. **10**, 473 [1968].  
<sup>7</sup> C. J. N. WAGNER, unveröffentlicht.  
<sup>8</sup> G. GAGLIOTI, M. CORCHIA u. R. RIZZI, Nuovo Cim. **40 B**, 222 [1967].  
<sup>9</sup> B. A. DASANNACHARYA, Q. O. NAVARRO, H. IBARRA, S. CHATRAPORN u. G. B. LEE, Phys. Rev. **173**, 241 [1968].  
<sup>10</sup> D. M. NORTH, J. E. ENDERBY u. P. A. EGELSTAFF, J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.), Ser. 2, **1**, 1075 [1968].  
<sup>11</sup> R. W. CAPUTI, S. E. RODRIGUEZ u. C. J. PINOS, Phys. Chem. Liquids **1**, 121 [1968].  
<sup>12</sup> P. ASCARELLI, Phys. Rev. **143**, 36 [1966].