

# Über die Struktur von Si-, Ge-, Sn- und Pb-Schmelzen \*

J. P. Gabathuler und S. Steeb

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaften, Stuttgart

Z. Naturforsch. 34a, 1314–1319 (1979); eingegangen am 20. September 1979

*Structure of Si-, Ge-, Sn-, and Pb-melts*

The structure factors of the molten elements Si and Ge were determined by means of neutron diffraction. Together with the structure factors of molten Sn and Pb, taken from literature, specific variations in the run of the curves can be detected. Especially, a shoulder on the larger  $q$ -side of the main maximum becomes larger going from Pb to Si. A model is given which describes these melts as being composed of hard spheres and tetrahedra. The concentration of tetrahedra is evaluated.

## Einleitung

Während die Reihe der Schmelzen von Elementen der Gruppe VA des Periodensystems, nämlich P, As, Sb und Bi gut untersucht ist [1], steht eine einheitliche Betrachtungsweise der Elementschmelzen der Elemente Si, Ge, Sn und Pb aus Gruppe IVA des Periodensystems noch aus. Über Röntgenbeugungsuntersuchungen an Schmelzen von Sn und Pb wurde z.B. in [2] berichtet. Silicium-Schmelzen wurden bisher bereits mittels Röntgenbeugung [3, 4, 5] untersucht, jedoch können den meisten dieser Arbeiten, ausgenommen [5], keine aussagekräftigen Ergebnisse entnommen werden, und es wurden deshalb an Silicium-Schmelzen ebenso wie an Germanium-Schmelzen Neutronenbeugungsexperimente durchgeführt, über die im folgenden berichtet werden soll.

## I. Theoretische Grundlagen

### 1. Strukturfaktor

Die mathematische Behandlung der mit Neutronen gemessenen Intensitätskurven soll hier in gestraffter Form dargestellt werden, da diese an anderer Stelle ausführlich beschrieben wurde [1, 6]. Die gemessenen Intensitäten werden zunächst auf Absorption in der Probe und in der Kuvette sowie auf Streubehälften der Probenumgebung korrigiert [7]. Durch Normierung der korrigierten Intensitäts-

kurve nach Krogh-Moe [8] erhält man nach Berücksichtigung von inkohärenter Streuung, Mehrfachstreuung [9] und inelastischer Streuung den kohärenten differentiellen Wirkungsquerschnitt  $(d\sigma/d\Omega)_{COH}(q)$  und damit nach Gl. (1) den Strukturfaktor  $S(q)$ :

$$S(q) = \left[ \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{COH}(q) \right] b^{-2} \quad (1)$$

mit  $q = 4\pi \sin \Theta/\lambda$ ,  $\Theta$  = halber Beugungswinkel,  $b$  = kohärente Streulänge,  $\lambda$  = Wellenlänge der Neutronen.

Die Atomdichteverteilungsfunktion  $g(r) = \varrho(r)/\varrho_0$  ergibt sich aus folgender Beziehung:

$$\begin{aligned} 4\pi \varrho_0 r(g(r) - 1) &= (2) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty q(S(q) - 1) \sin qr \cdot dq \end{aligned}$$

mit  $r$  = Ortskoordinate,  $\varrho_0$  = mittlere Anzahldichte,  $\varrho(r)$  = Anzahldichte am Ort  $r$ .

## II. Experimentelles

Die Neutronenbeugungsexperimente wurden mit dem Instrument D 4 am Hochflußreaktor des ILL, Grenoble, durchgeführt unter Verwendung heißer Neutronen der Wellenlänge 0,692 Å im  $q$ -Bereich von 0,2 bis 10 Å<sup>-1</sup> entsprechend einem  $2\Theta$ -Bereich von 1,3° bis 68°. Die Messung erfolgte mit einer Schrittweite  $\Delta 2\Theta = 0,18^\circ$  mit Impulsvorwahl an einem aus 20 Einzelzählrohren bestehenden Multizähler.

Die Proben wurden in Hohlzylindern (12 mm Innendurchmesser, 1 mm Wandstärke, 70 mm Höhe) aus einkristallinem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> untersucht. Die

\* Dieser Arbeit liegen Neutronenbeugungsexperimente zu grunde, die am ILL, Grenoble, ausgeführt wurden.

Reprint requests to Prof. Dr. S. Steeb, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaften, Seestraße 92, D-7000 Stuttgart.

0340-4811 / 79 / 1100-1314 \$ 01.00/0. — Please order a reprint rather than making your own copy.



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.

Heizung erfolgte durch direkten Stromdurchgang in Vanadiumheizrohren (bis 1200 °C) bzw. Niobheizrohren bei den höheren Temperaturen.

### III. Ergebnisse

#### 1. Strukturfaktoren

Der erhaltene Strukturfaktor einer Siliciumschmelze ist in Abb. 1, oberste Kurve, wiedergegeben.

Das Flüssigkeitshauptmaximum liegt bei  $q = 2,78 \text{ \AA}^{-1}$  und die Höhe des Maximums beträgt  $S(2,78 \text{ \AA}^{-1}) = 1,68$ . Auf der rechten Seite dieses sehr niedrigen und breiten Hauptmaximums befindet sich eine relativ breite Schulter. Die bei 960 °C und 1300 °C an geschmolzenem Ge erhaltenen Strukturfaktoren sind ebenfalls in Abb. 1 abgebildet. Diejenigen für Sn und Pb wurden der Arbeit [2] entnommen.

Wie aus Abb. 1 folgt, verändert sich der Verlauf des Strukturfaktors ausgehend von demjenigen des Blei über den des Zinn und den des Germanium bis hin zu dem des Silicium folgendermaßen: Das Hauptmaximum ist jeweils breiter und niedriger; eine Schulter auf seiner rechten Flanke, die bei Blei noch nicht auftritt, tritt bei Zinn in Erscheinung und wird bei Germanium und Silicium immer ausgeprägter.

#### 2. Atomdichteverteilung

Durch Fourier-Transformation wurde  $g(r)$  für Silicium bei 1430 °C und für Germanium bei 960 °C und 1300 °C ermittelt (Abb. 2) und daraus die Radien  $r^I$  und  $r^{II}$  der ersten beiden Koordinationsphären bestimmt. Zwischen dem ersten und zweiten Hauptmaximum ist jeweils ein niedriges Nebenmaximum zu erkennen, das nicht auf den

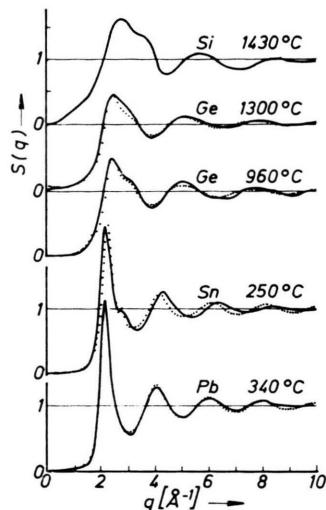


Abb. 1. Schmelzen von Silicium, Germanium, Zinn und Blei: — Strukturfaktoren, ..... Modell.

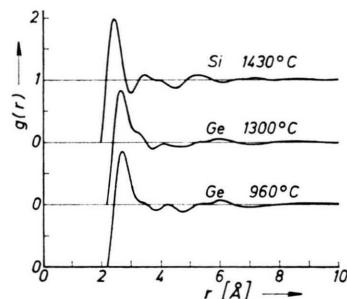


Abb. 2. Schmelzen von Silicium und Germanium: Atomdichteverteilungsfunktionen  $g(r)$ .

Abbrucheffekt zurückzuführen ist. In Tab. 1 sind die wichtigsten Abstände und Koordinationszahlen von Silicium, Germanium, Zinn und Blei zusammengestellt.

Tab. 1. Strukturdaten der Elemente Silicium, Germanium, Zinn und Blei.  $q^I$  und  $q^{II}$ : Lage des ersten und zweiten Maximums von  $S(q)$ ,  $r^I$  und  $r^{II}$ : Lage des ersten und zweiten Maximums von  $g(r)$ ,  $N^I$ : Koordinationszahl der ersten Koordinationssphäre.

Element	Temperatur [°C]	$q^I$	$q^{II}$	$q^{II}/q^I$	$S(q^I)$	$r^I$	$r^{II}$	$r^{II}/r^I$	$g(r^I)$	$N^I$	Zitat
Si	1430	2,78	5,7	2,05	1,68	2,5	5,33	2,14	2,23	6,4	{ diese
Ge	960	2,47	5,08	2,06	1,54	2,63	5,85	2,22	2,1	6,5	} Arbeit
Ge	1300	2,51	5,12	2,04	1,46	2,67	6,0	2,25	1,86	6,5	
Sn	250	2,21	4,33	1,96	2,3	3,23	6,3	1,95		10,9	[2]
Pb	340	2,28	4,23	1,86	2,5	3,33	6,4	1,92		10,9	[2]

Die jeweils erste Koordinationszahl von Silicium und Germanium unterscheidet sich mit 6,5 Nachbarn sehr stark von derjenigen der Metalle, welche typischerweise etwa zehn nächste Nachbarn aufweisen.

#### IV. Diskussion der Ergebnisse

Mit dem Modell harter Kugeln können diejenigen Metallschmelzen beschrieben werden, welche im Verlauf des Strukturfaktors keine Besonderheiten aufweisen. Tritt jedoch wie im Fall von Silicium, Germanium oder Zinn an der Seite großer  $q$ -Werte des ersten Maximums eine Schulter auf, dann muß ein komplizierteres Modell herangezogen werden. Gleichzeitig bedeutet dies, daß diese Schmelzen nicht als rein metallisch zu betrachten sind, sondern einen bestimmten Anteil an kovalenter Bindung aufweisen. Die in Abb. 1 gezeigten Strukturfaktoren sollen nunmehr mit demselben Modell beschrieben werden, das dann im Spezialfall entsprechend zu modifizieren ist.

An Modellen, die bisher für die Beschreibung der Strukturfaktoren mit Schulter speziell bei den Elementschmelzen von Germanium und Silicium angewendet wurden, seien die folgenden aufgeführt.

Orton [11] hat zur Deutung seiner an Germanium erhaltenen Ergebnisse ein doppeltes Hartes-Kugel-Modell vorgeschlagen, mit dessen Hilfe bei der Beschreibung des Hauptmaximums und der Schulter sowie bezüglich der Periode der Oszillationen bei höheren  $q$ -Werten gewisse Schwierigkeiten auftreten. Isherwood et al. [12] haben für die Germanium-Schmelze ein Modell vorgeschlagen, wobei Agglomerate, bestehend aus jeweils sieben Atomen, lose geschüttet wurden. Diese Agglomerate sind aufgebaut entsprechend der Umgebung eines Zinn-Atomes im festen weißen Zinn. Poltavtsev [3] erarbeitete ein Modell für Germanium mit zwei Anteilen, nämlich einem Anteil, in dem die Verteilung der ersten Nachbarn derjenigen in einem einfach kubischen Gitter entspricht und einem zweiten Anteil, in dem die Atome in regeloser Anordnung vorliegen. Weiterhin [3] wurden die Atomverteilungsfunktionen von Silicium mit dem Modell eines verwackelten einfach kubischen Gitters verglichen. Kurukawa [13] schlug für Zinn, Waseda und Suzuki [5] für Silicium und Germanium ebenfalls Modelle mit zwei Anteilen vor, wobei im einen Anteil Einzelatome auftreten, die entsprechend

einem geschmolzenen Metall angeordnet sind und wobei im an lernen Anteil kovalent gebundene Atome vorkommen. Nach Kurukawa sollen diese kovalenten Bindungen innerhalb tetraederförmiger Atomanordnungen vorliegen.

Im folgenden wird ein aus zwei Anteilen bestehendes Modell mathematisch formuliert, wobei davon auszugehen ist, daß die in den Schmelzen befindlichen Atome zwei verschiedene Umgebungen haben können:

- Die mit „1“ zu bezeichnenden Atome besitzen den Radius  $R_1$  und sind regellos angeordnet.
- die mit „2“ zu bezeichnenden Atome gehören zu molekularartigen Agglomeraten, innerhalb derer sie den Radius  $R_2$  aufweisen. Mit den Atomen desselben Agglomerates sind sie jeweils kovalent gebunden. Außerdem weisen sie gegenüber allen Atomen, welche nicht zu dem Agglomerat gehören, in welchem sie sich befinden, einen Radius  $R_1$  auf. Für die Abstände  $D_{ij}$  zwischen  $i$ - und  $j$ -Atomen soll somit gelten

$$2R_1 = D_{11} = D_{12} = D_{21} = D_{22} = 2R_2. \quad (3)$$

Der totale Strukturfaktor für eine aus zwei Strukturanteilen aufgebaute Schmelze, bestehend aus einer Atomsorte, läßt sich folgendermaßen darstellen:

$$S(q) = c_1^2 S_{11}(q) + 2c_1 c_2 S_{12}(q) + c_2^2 S_{22}(q), \quad (4)$$

wobei  $c_1$  und  $c_2$  die beiden atomaren Konzentrationen der Anteile 1 und 2 in der Schmelze bedeuten.  $S_{11}(q)$ ,  $S_{12}(q)$  und  $S_{22}(q)$  beschreiben die entsprechenden partiellen Strukturfaktoren. Entsprechend dem in Gl. (3) für die  $D_{ij}$  Ausgeföhrten kann in nullter Näherung auch gesetzt werden:

$$S_{11}(q) = S_{12}(q).$$

Damit folgt aus Gl. (4):

$$S(q) = c_1(1 + c_2) S_{11}(q) + c_2^2 S_{22}(q). \quad (5)$$

Dabei bedeutet:

$S_{11}(q)$  = Strukturfaktor, der die ungebundenen Atome 1 charakterisiert. Dieser Strukturfaktor kann mittels eines Harten-Kugel-Modells beschrieben werden.

$S_{22}(q)$  = Strukturfaktor, der die kovalent gebundenen Atome charakterisiert. Dieser Strukturfaktor kann wie der einer Molekülschmelze betrachtet werden.

Nach Powles [14] läßt sich der Strukturfaktor einer Molekülschmelze folgendermaßen beschreiben:

$$S_{22}(q) = N[f_1(q) + f_2(q)\{S_c(q) - 1\}], \quad (6)$$

wobei

$N$  = Anzahl der Atome pro Molekül,

$f_1(q)$  = intramolekularer Strukturfaktor,

$f_2(q)$  = Strukturfaktor, der die Korrelation der Orientierung der Moleküle zueinander beschreibt.

$S_c(q)$  = Strukturfaktor, der die Anordnung der Moleküle beschreibt.

Im folgenden soll die Ermittlung der drei Strukturfaktoren  $f_1(q)$ ,  $f_2(q)$  und  $S_c(q)$  für das hier vorgeschlagene Modell diskutiert werden.

Bezüglich des Molekülaufbaues stellte es sich nach verschiedenen Versuchen heraus, daß die Meßkurve in Abb. 1 am besten mit tetraedrischen, vieratomigen, d.h. also nicht innenzentrierten Molekülen beschrieben werden kann: Vier Atome sind auf den vier Ecken eines Tetraeders angeordnet. Zur Berechnung von  $f_1(q)$  für diesen Fall greifen wir auf eine von Powles [14] gegebene Gleichung zurück:

$$f_1(q) = \frac{\left\langle \left| \sum_{n=1}^N b_n e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n} \right|^2 \right\rangle}{\left( \sum_{n=1}^N b_n \right)^2} \quad (7)$$

mit

$\mathbf{r}_n$  = Vektor zwischen dem Zentrum eines Moleküls und dessen  $n$ tem Atom,

$b_n$  = Streulänge des  $n$ ten Atoms,

$\langle \rangle$  = Mittelwert über alle Tetraeder der Schmelze.

Da nur eine Sorte von Atomen vorkommt, sind alle Streulängen gleich. Außerdem ist  $N=4$ . Damit läßt sich Gl. (7) folgendermaßen schreiben:

$$f_1(q) = \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{3}{4} \frac{\sin q D_{22}}{q D_{22}} \right), \quad (8)$$

wobei  $D_{22}$  den Abstand zwischen zwei Atomen im Tetraeder bedeutet.

Falls die Moleküle der Schmelze unkorrelierte Orientierungen haben, läßt sich  $f_2(q)$  folgendermaßen beschreiben:

$$f_{2u}(q) = \frac{\left| \sum_{n=1}^N b_n \langle e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n} \rangle \right|^2}{\left( \sum_{n=1}^N b_n \right)^2}. \quad (9)$$

Für den Fall unkorrelierter Tetraeder folgt daraus:

$$f_{2u}(q) = (\sin q r_A / q r_A)^2, \quad (10)$$

wobei  $r_A$  den Abstand zwischen Zentrum des Tetraeders und einem Atom bedeutet.

Es ist zu bemerken, daß die hier gemachte Annahme unkorrelierter Orientierung der verschiedenen Moleküle nur gültig ist, wenn die Konzentration nicht zu groß ist.

Für  $S_c(q)$  wurde die Annahme gemacht, daß die Tetraeder in erster Näherung kugelsymmetrisch sind und deswegen ihre gegenseitige Lage-Korrelation mit einem Harten-Kugel-Modell zu beschreiben ist.

In den Gln. (8) und (10) sind die Abstände  $D_{22}$  und  $r_A$  wegen Temperaturbewegung nicht konstant, weshalb ein Temperaturfaktor eingeführt wurde:

$$f_1(q) = \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{3}{4} \frac{\sin q D_{22}}{q D_{22}} \cdot \exp \{-c \langle u^2 \rangle q^2\} \right), \quad (11)$$

$$f_{2u}(q) = \left( \frac{\sin q r_A}{q r_A} \right)^2 \cdot \exp \{-2c \langle u^2 \rangle q^2\}. \quad (12)$$

Dabei gilt:

$c$  = Konstante, die nach [15] zwischen  $\frac{1}{12}$  und  $\frac{1}{2}$  liegt. Hier wurde  $c = \frac{1}{2}$  angenommen.

$\langle u^2 \rangle$  = Quadrat des Mittelwertes der Vibrationsamplitude.

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar^2 \cdot T \cdot N_L}{A \cdot \Theta_D^2 \cdot k_B} = 4,844 \cdot 10^{-5} \frac{T}{A \cdot \Theta_D^2} [\text{cm}^2], \quad (13)$$

$N_L$  = Loschmidt-Zahl,  $\Theta_D$  = Debye-Temperatur,  $k_B$  = Boltzmann-Konstante,  $A$  = Atomgewicht.

Hier wurde für die Berechnung von  $\langle u^2 \rangle$  angenommen, daß die Atome im Tetraeder mit der Debye-Frequenz vibrieren.

In Tab. 2 sind alle benötigten Parameter, mit welchen die Kurven von Blei, Zinn und Germanium am besten angepaßt werden können, wiedergegeben. Die mit diesen Parametern berechneten  $S$ -Kurven sind in Abb. 1 zum Vergleich mit den experimentellen Daten als gepunktete Linien eingetragen.

Tab. 2. Parameter zur Berechnung des Modells für Pb, Sn und Ge.

		Pb	Sn	Ge	Ge
Temperatur [°C]	$T$	340	250	960	1300
Konzentration der Atome	Sorte 1	$c_1$	1	0,55	0,23
	Sorte 2	$c_2$	0	0,45	0,77
Gewichtsfaktoren in Gleichung (5):					
Einzelatom-Anteil		$c_1(1 + c_2)$	1	0,8	0,4
Molekül-Anteil		$c_2^2$	0	0,20	0,60
Einzelatom-Anteil					
Packungsdichte		$\eta^{HK}$	0,46	0,47	0,43
Abstand zwischen Atomen [Å]		$r^{HK}$	3,15	3,05	2,75
Molekül-Anteil					
Abstand zwischen Atomen innerhalb eines Tetraeders [Å]		$D_{22}$	—	2,6	2,6
Temperaturfaktor [Å <sup>2</sup> ]		$u^2$	—	0,0051	0,006
Packungsdichte der Tetraeder		$\eta_c^{HK}$	—	0,77	0,55
Abstand zwischen Tetraedern [Å]		$r_c^{HK}$	—	5,05	4,0
					3,8

Folgende Tatsachen können festgestellt werden:

Die Blei-Schmelze kann sehr gut mit einem Harten-Kugel-Modell beschrieben werden. Die Einführung eines kovalenten Anteils erübrigtsich. Blei ist demnach im geschmolzenen Zustand als rein metallisch zu betrachten. Von Blei über Zinn zum Germanium wächst der Anteil der kovalenten Bindung. Die Packungsdichte  $\eta_c^{HK}$  erreicht sehr hohe Werte bei Zinn. Die Ursache dafür ist, daß Tetraeder viel dichter aneinander gepackt sein können als die sie umschreibenden Kugeln.

Da, verglichen zu Silicium, Germanium bereits bei 950 °C schmilzt, gibt es die Möglichkeit, dieses Element auch bei höherer Temperatur zu untersuchen. In Abb. 3 sind die beiden Strukturfaktoren von Germanium bei 960 °C und 1300 °C wiedergegeben. Bei 1300 °C sind die Oszillationen des Strukturfaktors kleiner und die Schulter nicht mehr so stark ausgeprägt. Das Modell reproduziert diese bei hoher Temperatur erhaltene Kurve ebenfalls sehr gut. In Tab. 2 ist zu bemerken, daß im Falle des Ge bei der höheren Temperatur die Konzen-

tration des kovalent gebundenen Anteils geringer ist. Auch sind für die Packungsdichten  $\eta^{HK}$  und  $\eta_c^{HK}$  bei der höheren Temperatur kleinere Werte erforderlich. Nach Faber [16] ist beim Modell Harter-Kugeln die Packungsdichte eine temperaturabhängige Größe:

$$\eta = \eta_0 T^{-\nu}, \quad (14)$$

wobei  $\eta_0$  eine hypothetische Packungsdichte bei  $T=0$  K und  $\nu$  eine Konstante ist, deren Wert für Messungen bei konstantem Volumen  $\nu=0,31$  beträgt. Bezeichnet man mit  $T_1$  und  $T_2$  die beiden Meßtemperaturen und  $\eta^{T_1}$  bzw.  $\eta^{T_2}$  die entsprechenden Packungsdichten, dann gilt entsprechend Gleichung (14)

$$\eta^{T_1} = \eta^{T_2} (T_1/T_2)^{-\nu}. \quad (15)$$

Im vorliegenden Fall ergibt sich

$$\eta^{HK, 1300} = 0,398 \quad \text{und} \quad \eta_c^{HK, 1300} = 0,508.$$

Diese aufgrund der Faberschen Theorie [16] berechneten Werte stimmen überraschend gut mit den in Tab. 2 aufgeführten, durch Vergleich der Modellkurven mit den gemessenen Kurven erhaltenen Werte überein.

Aus Tab. 2 ist ersichtlich, daß die Konzentration  $c_2$  bei Blei Null, bei Zinn 0,45 und bei Germanium 0,75 ist. Eine befriedigende Beschreibung des in Abb. 1 gezeigten Strukturfaktors der Siliciumschmelze auf der Basis dieses Modells war bisher in quantitativer Weise noch nicht möglich. Ein Grund für diesen Umstand mag sein, daß bei der Si-Schmelze die Annahme unkorrelierter Orientierung der Tetraeder nicht mehr zutrifft.

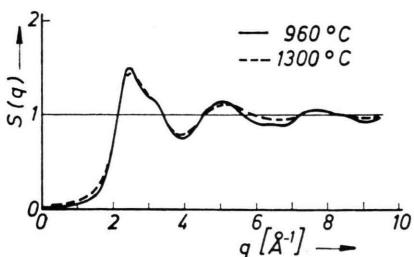


Abb. 3. Germanium-Schmelze: Strukturfaktoren:  
— 960 °C, - - - 1300 °C.

Das Problem der Korrelation der Orientierung der Moleküle in einer Schmelze ist sehr kompliziert zu lösen. Im Fall von Silicium wird diese Lösung deshalb erschwert, weil die Silicium-Schmelze nicht eine reine Molekül-Schmelze ist, sondern auch einen bestimmten Anteil von Einzel-Atomen in regelloser Anordnung beinhalten kann.

Als Schlußfolgerung ist zu vermerken, daß sich die Schmelzen der Elemente der vierten Spalte des Periodensystems mit Ausnahme von Kohlenstoff und Silicium durch ein Modell mit zwei Anteilen

quantitativ beschreiben lassen. Der metallische Charakter der Schmelze wird mit steigender Ordnungszahl größer, umgekehrt wächst der kovalente Charakter der Schmelze mit abnehmender Ordnungszahl. Ein analoger Schluß war in [1] für die Elementschmelzen der fünften Gruppe des Periodensystems gezogen worden.

Dem Institut für Forschung und Entwicklung der Firma Alusuisse sei für finanzielle Unterstützung bestens gedankt.

- [1] P. Lamparter, S. Steeb u. W. Knoll, Z. Naturforsch. **31a**, 90 (1976).
- [2] Y. Waseda, F. Takahashi u. K. Suzuki, Sci. Rep. Res. Inst. **23**, 127 (1972).
- [3] Yu. G. Poltavtsev, Sov. Phys. Cryst. **16**, 387 (1971).
- [4] N. A. Vatolin, E. A. Pastukhov u. E. M. Kern, Dokl. Akad. Nauk SSSR **217**, 611 (1974).
- [5] Y. Waseda u. K. Suzuki, Z. Physik **B 20**, 339 (1975).
- [6] J. P. Gabathuler, Dissertation, Universität Stuttgart 1978.
- [7] H. Bertagnoli, P. Chieux u. M. D. Zeidler, Molec. Phys. **32**, 759 (1976).
- [8] J. Krogh-Moe, Acta Cryst. **9**, 951 (1956).
- [9] I. A. Blech u. B. L. Averbach, Phys. Rev. **137 A**, 1113 (1965).
- [10] G. Placzek, Phys. Rev. **86 A**, 377 (1952).
- [11] B. R. Orton, Z. Naturforsch. **30a**, 1500 (1975).
- [12] S. P. Isherwood, B. R. Orton u. R. Manaila, J. Non-Cryst. Solids **8–10**, 691 (1972).
- [13] K. Furukawa, B. R. Orton, J. Hamor u. G. I. Williams, Phil. Mag. **8**, 141 (1963).
- [14] J. G. Powles, Adv. Physics **22**, 1 (1973).
- [15] J. H. Clarke, J. C. Dore, G. Walford u. R. N. Sinclair, Mol. Physics **31**, 883 (1976).
- [16] T. E. Faber, Theory of Liquid Metals, Cambridge Press, London 1972.