

Die Doppelstruktur von geschmolzenem Thallium nach der Fourier-Analyse der Intensitätskurve

R. LEONHARDT und H. RICHTER

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart

(Z. Naturforsch. 21 a, 179—180 [1966]; eingeg. am 19. Dezember 1965)

Nach RICHTER und BREITLING¹, vgl. S. 1073 und Tab. 2] tritt der $r_1\sqrt{3}$ -Abstand in der Tl-Schmelze bevorzugt auf. Das geschmolzene Tl wurde daher erneut untersucht. In den Abb. 1 bis 4 sind vier Atomverteilungskurven von Tl bei verschiedenen Temperaturen wiedergegeben (Schmelzpunkt: $T_S = 302,5^\circ\text{C}$).

In Abb. 1 markieren die eingezeichneten Pfeile \downarrow die Atomabstände der dichtesten Kugelpackung (Kugelmodell-Struktur), und zwar auf die Untersuchungstemperatur $T_U \approx 350^\circ\text{C}$ bezogen. Der kürzeste Atomabstand $r_1 = 3,46 \text{ \AA}$ (12 Atome) fixiert das erste Maximum; weitere Maxima folgen bei $r_1\sqrt{3} = 5,99 \text{ \AA}$ (18 Atome) und bei $r_1\sqrt{6,67} = 8,93 \text{ \AA}$ (12 Atome) [α -Tl: $a_H = 3,45 \text{ \AA}$; $c_H/a_H = 1,60$]. Die Atomabstände bzw. die Maxima bei $2r_1' = 6,50 \text{ \AA}$ und $3r_1' = 9,75 \text{ \AA}$, gekennzeichnet durch die Pfeile \downarrow , sind der Flächengitter-Struktur mit $r_1' = 3,25 \text{ \AA}$ als kürzestem Atomabstand zuzuordnen. Das Maximum bei $3r_1' = 9,75 \text{ \AA}$ ist durch

einen benachbarten Atomabstand der Kugelmodell-Struktur nach kleinen Abstandswerten verschoben.

Nach RICHTER und HANDTMANN² lockert die Kugelmodell-Struktur mit wachsender Temperatur auf, und die Flächengitter-Struktur mit ihren geringen Abstandsschwankungen der Atome tritt immer stärker hervor. So bestimmt in Abb. 2 ($T_U \approx 500^\circ\text{C}$) die Flächengitter-Struktur die Lage des ersten Maximums bei $r_1' = 3,25 \text{ \AA}$ und wie in Abb. 1 die Maxima bei $2r_1' = 6,50 \text{ \AA}$ und $3r_1' = 9,75 \text{ \AA}$. Der kürzeste Gitterabstand von β -Tl, oberhalb 230°C beständig, mit $a_w = 3,87 \text{ \AA}$ ist $a_w/2 \cdot \sqrt{3} = 3,35 \text{ \AA}$; er ist nicht mit dem kürzesten Atomabstand $r_1' = 3,25 \text{ \AA}$ der Flächengitter-Struktur identisch. Von den Atomabständen der Kugelmodell-Struktur treten die Abstände $r_1\sqrt{3} = 5,99 \text{ \AA}$ und $r_1\sqrt{7} = 9,15 \text{ \AA}$ mit 24 Atomen auf. Zum ersten Male gelang es hier:

- den $r_1\sqrt{3}$ -Abstand durch FOURIER-Analyse der Intensitätskurve zu erhalten und
- die Kugelmodell- und die Flächengitter-Struktur, also beide Strukturen, nebeneinander in der Atomverteilungskurve nachzuweisen.

In den Bereichen der dichtesten Kugelpackung ist der Atomabstand $r_1' < r_1 = r_{12}$ nicht möglich; es müssen daher in kleinsten Bereichen der Tl-Schmelze zwei Strukturen nebeneinander vorkommen.

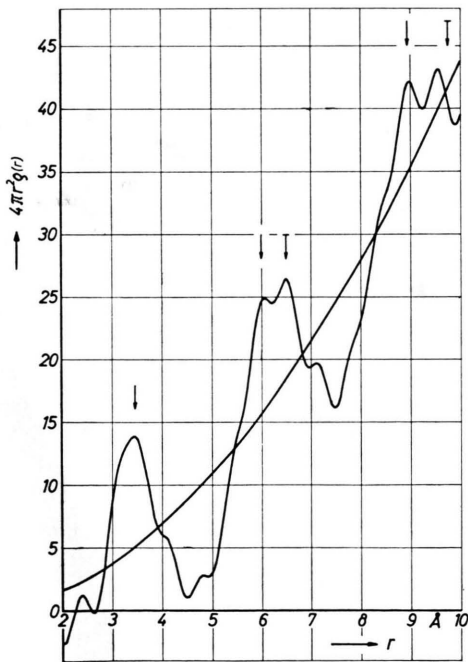


Abb. 1. $s_1 = 0$ bis $s_2 = s_{\text{max.}} = 10,5$.

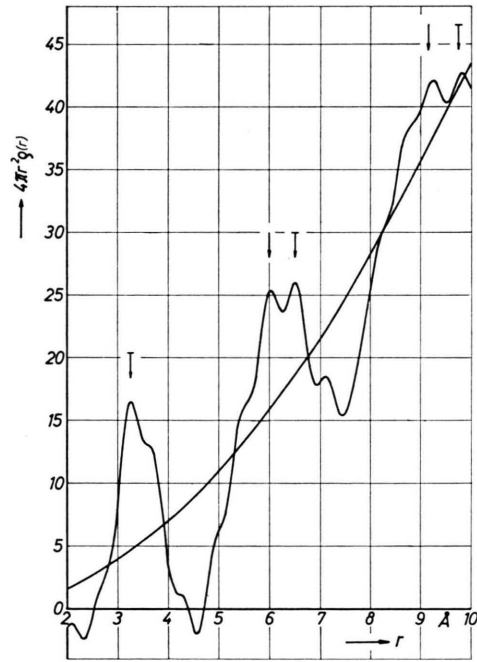


Abb. 2. $s_1 = 0$ bis $s_2 = s_{\text{max.}} = 11,6$.

Abb. 1 und 2. $4\pi r^2 \rho(r)$ -Kurven von geschmolzenem Thallium.

¹ H. RICHTER u. G. BREITLING, Z. Naturforsch. 20 a, 1061 [1965].

² H. RICHTER u. D. HANDTMANN, Z. Phys. 181, 206 [1964].



Die $i(s)_{\text{exp.}}$ -Kurve mit der maximalen Integrationslänge $s_2 = s_{\text{max.}} = 11,6$, die in Abb. 2 Verwendung fand, wurde in Abb. 3 nur bis $s_2 = 10,6$ analysiert. Jetzt fließen die Maxima wegen der geringeren Auflösung bis auf die äußeren ineinander, und man erhält ein verwaschenes Bild von der tatsächlich vorliegenden Struktur. Man sieht, wie wichtig es ist, die Intensitätskurve bis zu möglichst großen Streuwinkeln aufzunehmen.

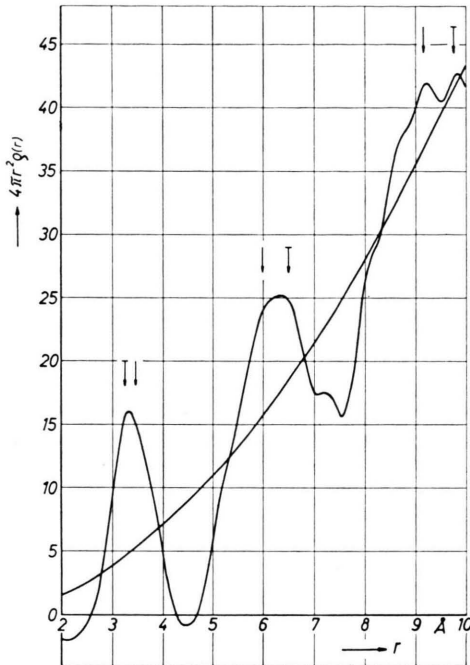


Abb. 3. Die gleiche $i(s)_{\text{exp.}}$ -Kurve wie in Abb. 2, doch nur bis $s_2 = 10,6$ analysiert.

In Abb. 4 wurde eine bei $T_U \approx 650^\circ\text{C}$ erhaltene Intensitäts- bzw. $i(s)_{\text{exp.}}$ -Kurve abschnittsweise ($s_1 = 3,0$ und $s_2 = 8,6$) analysiert. Da in diesem Integrationsintervall die Interferenzfunktionen $(\sin sr)/(sr)$ der Kugelmodell-Struktur weitgehend abgeklungen sind, zeichnen sich diesmal vornehmlich die Atomabstände der Flächengitter-Struktur durch die Maxima bei $r_1' = 3,25 \text{ \AA}$, $2r_1' = 6,50 \text{ \AA}$ und $3r_1' = 9,75 \text{ \AA}$ ab. Das Fehlen

³ Dabei ist das zentrale Modulationsmaximum jeweils als 0. Maximum bezeichnet [vgl. ⁴].

⁴ G. BREITLING, D. HANDTMANN u. H. RICHTER, Z. Phys. **178**, 294 [1964].

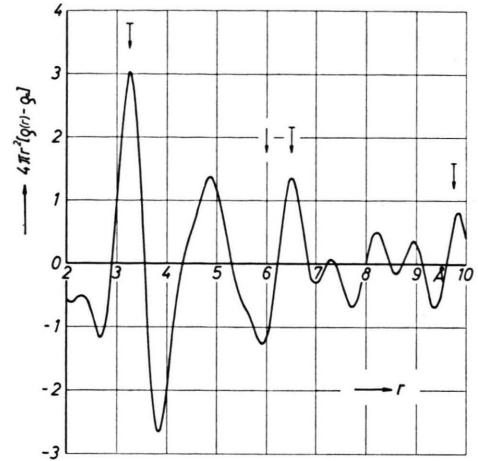


Abb. 4. $4\pi r^2[\rho(r) - \rho_0]$ -Kurve von geschmolzenem Thallium bei abschnittweiser FOURIER-Analyse mit $s_1 = 3,0$ und $s_2 = 8,6$.

des $r_1\sqrt{3}$ -Abstandes (\downarrow) ist zu beachten. Sämtliche weiteren Maxima in Abb. 4 lassen sich ohne Schwierigkeit deuten. So ist das ausgeprägte Maximum bei $r \approx 4,85 \text{ \AA}$ nicht reell, es kommt durch Überlagerung der beiden ersten (+1. und -1.) zu den Atomabständen $r_1' = 3,25 \text{ \AA}$ und $2r_1' = 6,50 \text{ \AA}$ gehörigen Modulationsmaxima³ zustande, alle weiteren Maxima sind reell. Die drei Atomabstände r_1' , $2r_1'$ und $3r_1'$ der Flächengitter-Struktur bestimmen in Abb. 4 den Verlauf der $4\pi r^2[\rho(r) - \rho_0]$ -Kurve und damit geht der Schwebungscharakter verloren, wie er für das Vorliegen eines einzigen Atomabstandes, einer einzigen Interferenzfunktion der Form $\sin x/x$ charakteristisch ist. Die Schwebungen wurden von BREITLING, HANDTMANN und RICHTER⁴ bei geschmolzenem Ag, Pb und Hg sowie von RICHTER und HANDTMANN² bei geschmolzenem Sn beobachtet, ebenso von RICHTER und BREITLING⁵ bei festem amorphem As und Se.

Nach RICHTER und BREITLING⁵ sollte sich der $r_1\sqrt{3}$ -Abstand auch bei geschmolzenem Mg bevorzugt in der Atomverteilungskurve abzeichnen [vgl. STEEB und WOERNER⁶].

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft sei für die vielseitige Unterstützung dieser Untersuchungen bestens gedankt.

⁵ H. RICHTER u. G. BREITLING, Fortschr. Physik **14** [1966]; Z. Naturforsch. **21 a** [1966], in Vorbereitung.

⁶ S. STEEB u. S. WOERNER, Naturwiss. **50**, 543 [1963].