

## 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 BREITLING [1, 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 ↓ 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) [ $\alpha$ -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 ↓, 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 HANDMANN<sup>2</sup> 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  $\beta$ -Tl, oberhalb  $230^\circ\text{C}$  beständig, mit  $a_w = 3,87 \text{ \AA}$  ist  $a_w/2\sqrt{3} = 3,35 \text{ \AA}$ ; 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.

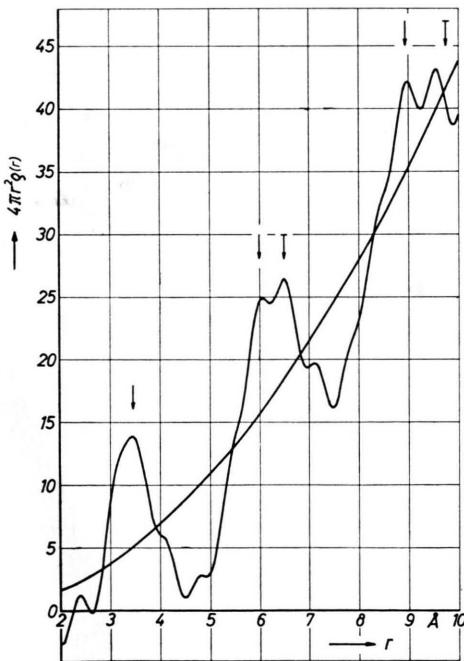


Abb. 1.  $s_1 = 0$  bis  $s_2 = s_{\max.} = 10,5$ .

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

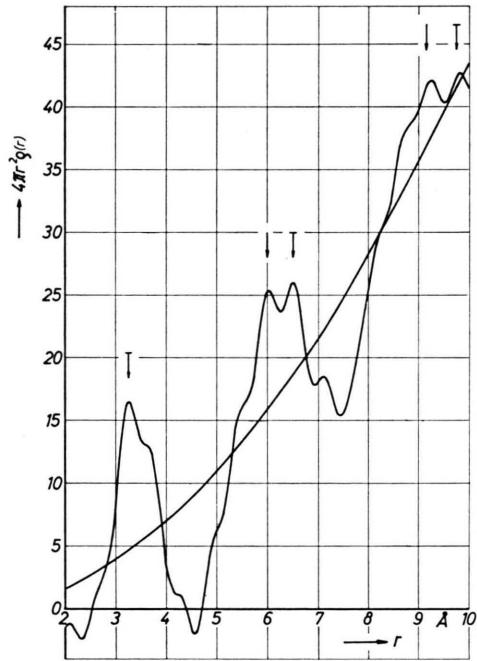


Abb. 2.  $s_1 = 0$  bis  $s_2 = s_{\max.} = 11,6$ .

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

<sup>2</sup> H. RICHTER u. D. HANDMANN, Z. Phys. 181, 206 [1964].



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.

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.

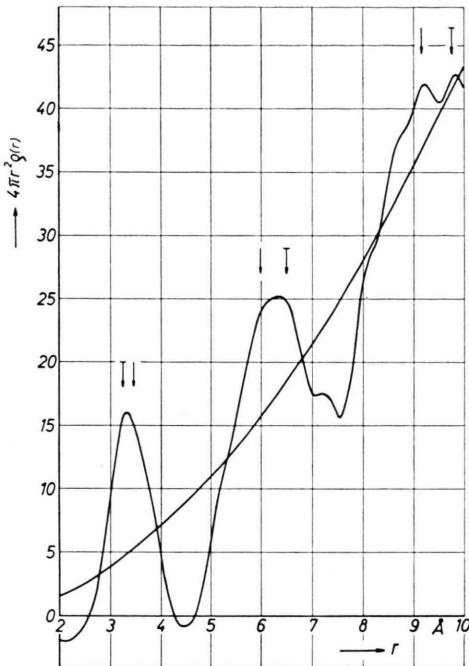


Abb. 3. Die gleiche  $i(s)_{\text{exp.}}$ -Kurve wie in Abb. 2, doch nur bis  $s_2 = 10,6$  analysiert.

In Abb. 4 wurde eine bei  $T_U \approx 650^\circ\text{C}$  erhaltene Intensitäts- bzw.  $i(s)_{\text{exp.}}$ -Kurve abschnittweise ( $s_1 = 3,0$  und  $s_2 = 8,6$ ) analysiert. Da in diesem Integrationsintervall die Interferenzfunktionen  $(\sin s r)/(s r)$  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

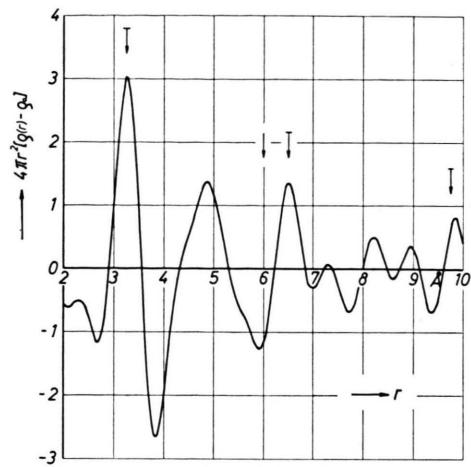


Abb. 4.  $4\pi r^2[\rho(r) - \rho_0]$ -Kurve von geschmolzenem Thallium bei abschnittsweise FOURIER-Analyse mit  $s_1 = 3,0$  und  $s_2 = 8,6$ .

des  $r_1\sqrt{3}$ -Abstandes (↓) 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 Modulationsmaxima<sup>3</sup> 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 RICHTER<sup>4</sup> bei geschmolzenem Ag, Pb und Hg sowie von RICHTER und HANDTMANN<sup>2</sup> bei geschmolzenem Sn beobachtet, ebenso von RICHTER und BREITLING<sup>5</sup> bei festem amorphem As und Se.

Nach RICHTER und BREITLING<sup>5</sup> sollte sich der  $r_1\sqrt{3}$ -Abstand auch bei geschmolzenem Mg bevorzugt in der Atomverteilungskurve abzeichnen [vgl. STEEB und WÖRNER<sup>6</sup>].

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

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

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

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

<sup>6</sup> S. STEEB u. S. WÖRNER, Naturwiss. **50**, 543 [1963].