

Equation (11 a) describes the temperature dependence of self-diffusion, (11 b) the self-diffusion coefficient at the melting point.

A careful recent analysis of experimental self-diffusion data for the alkali metals⁴ has yielded the following systematics:

$$\left\{ \begin{array}{l} D/D_m = 1 + \frac{(T/T_m - 1)}{\alpha} \\ \alpha = 0.275 \pm 0.008 \end{array} \right. \quad (12 a)$$

and

$$\left\{ \begin{array}{l} D_m = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{3 k T_m}{M}} V^{1/3} \beta \\ \beta = 0.112 \pm 0.008. \end{array} \right. \quad (12 b)$$

¹ R. C. BROWN and N. H. MARCH, Phys. Chem. Liquids **1**, 141 [1968].

² N. H. NACHTRIEB, Adv. Phys. **16**, 309 [1967].

³ See, e. g., N. F. MOTT and H. JONES, The Theory of the Properties of Metals and Alloys, Oxford Univ. Press, New York 1958.

Obviously Eqs. (12) have the same form as Eqs. (11), with

$$\alpha_{\text{theor}} = L/3 k T_m$$

and

$$\beta_{\text{theor}} = \sqrt[3]{\alpha_{\text{theor}}/C_L} (1 - \alpha_{\text{theor}})^{-1/2}.$$

The appropriate values of C_L and L can be found in the literature^{3,5}. The mean value of α_{theor} for Li, Na, K, Rb and Cs is **0.273**, with less than 6% rms error. The β_{theor} value becomes **0.11** with an uncertainty (due to different possible ways to measure Debye frequencies) of about 10%.

The theoretically derived parameters α and β , which completely describe the self-diffusion characteristic, are seen to differ by at most a few percent from the experimental values.

⁴ S. J. LARSSON, C. ROXBERGH, and A. LODDING, Phys. Chem. Liquids, in press.

⁵ Liquid Metals Handbook, Navexos P 733 (Rev.), p. 40 and 42 [1954].

Gitterkonstantenmessungen mit dem Röntgen-Diffraktometer

H. EBEL und M. EBEL

Institut für Technische Physik, Technische Hochschule Wien
(Z. Naturforsch. **27 a**, 874–876 [1972]; eingegangen am 23. März 1972)

Die Funktion des Diffraktometers mit Bragg-Brentano-Fokussierung kann als bekannt vorausgesetzt werden. Ebenso wurden die Parameter, welche die Gitterkonstantenbestimmung beeinflussen, bereits in zahlreichen Veröffentlichungen (z. B. Ref.¹) abgehandelt. Ziel des vorliegenden Beitrages soll es sein, eine Auswertemethode zu entwickeln, die es gestattet, einerseits die interessierende Gitterkonstante möglichst genau zu bestimmen, andererseits die wesentlichsten Fehlergrößen, wie die Exzentrizität der Probe (displacement) und den Nullpunktsfehler quantitativ zu erfassen.

a) Eine Probenexzentrizität liegt dann vor, wenn die Probe den Fokussierungskreis (Röntgen-Blende – Goniometerachse – Detektorblende) nicht tangential berührt, sondern entweder schneidet, oder aber außerhalb derselben liegt. Bei Pulverproben wird man diesen Fehler kaum vermeiden können. Hoch- oder Tieftemperaturuntersuchungen bedingen zusätzlich eine mehr oder weniger große temperaturabhängige Probenexzentrizität².

b) Der Nullpunktsfehler ergibt sich auch bei exakt justiertem Goniometer im Falle einer Registrieraufnahme, wo die Zeitkonstante des Integrierkreises eine Verschiebung des Interferenzprofils in Registrierrich-

tung zur Folge hat. Eine selten beachtete Ursache für den Nullpunktsfehler stellt eine gegenseitige Verschiebung der Schreiberfedern für den Intensitäts- und Winkelverlauf dar.

Um nun die Justierung hinsichtlich der beiden genannten Fehlergrößen nicht unnötig zu verkomplizieren und außerdem die Temperaturabhängigkeit von a quantitativ erfassen zu können, kann der folgende Weg beschritten werden. Die Gitterkonstante a_i – entsprechend einem Glanzwinkel θ_i – mit einem Millerschen Zahlentripel h_i lautet

$$a_i = a_0 + a_0 \frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\cos^2 \theta_i}{\sin \theta_i} - a_0 \Delta \theta \cot \theta_i, \quad (1)$$

a_0 die tatsächliche Gitterdimension (z. B. die Gitterkonstante im kubischen System),

ΔR die Abweichung der Probenebene von der Goniometerachse,

R der Goniometerradius (Abstand Goniometerachse – Detektorblende),

$\Delta \theta$ der Nullpunktsfehler.

Werden die Registrierrichtung, die Winkelgeschwindigkeit des Goniometers und die Registrierzeitkonstante gleich gehalten, so ist der Nullpunktsfehler unabhängig vom Glanzwinkel. Es sind somit drei Unbekannte, nämlich ΔR , $\Delta \theta$ und a_0 vorhanden, die zu ihrer Beschreibung der Vermessung von mindestens drei Interferenzprofilen bedürfen. Die „falsche“ Gitterkonstante a_i wird z. B. für das kubische System aus dem gemessenen Schwerpunktswinkel θ_i des Profils, der Wellenlänge λ der charakteristischen Strahlung und dem Wertetripel h_i mit Hilfe der Braggschen Gleichung berechnet.

$$a_i = \frac{\lambda \sqrt{h_i^2}}{2 \sin \theta_i}. \quad (2)$$

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. EBEL, Institut für Technische Physik der Technischen Hochschule Wien, A-1040 Wien, Karlsplatz 13, Österreich.



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 digitalized 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.

Durch Umformung von Gl. (1) erhält man:

$$\frac{a_i - a_0}{a_0} \cdot \operatorname{tg} \theta_i = \frac{\Delta R}{R} \cdot \cos \theta_i - \Delta \theta. \quad (3)$$

Trägt man den linken Teil der Gleichung als Funktion von $\cos \theta_i$ in einem Diagramm auf, so ergibt dies die Gleichung einer Geraden, mit $\Delta R/R$ als Steigung und $-\Delta \theta$ als Ordinatenabschnitt.

$$y_i = \left\{ (a_i - a_0) / a_0 \right\} \operatorname{tg} \theta_i, \quad x_i = \cos \theta_i. \quad (4)$$

Da nun a_0 ebensowenig bekannt ist wie $\Delta R/R$ und $\Delta \theta$, muß mit einer ersten Näherung begonnen werden. Es wird für a_0 jener Wert von a_i , entsprechend dem größten vermessenen Glanzwinkel $\theta_{i \max}$ eingesetzt, wo bekanntlich die Abweichung gegenüber a_0 minimal ist. Mit dieser Näherung wird untersucht, ob die Abbildung entsprechend Gl. (4) für die drei vermessenen Glanzwinkel θ_i eine Gerade ergibt. Ist dies der Fall, dann kann das Problem als gelöst betrachtet werden. Anderenfalls ist a_0 solange zu variieren, bis die Geradengleichung erfüllt ist. Wurden mehr als drei Interferenzen vermessen, so bewirken die statistischen Fehler eine Streuung der y_i -Werte um die Gerade und es ist die Methode des kleinsten Fehlerquadrates zu verwenden. Die Auswertung wird dann sinnvoll mittels eines Rechners vorgenommen. Damit ist das Prinzip des Auswertverfahrens skizziert.

Der Vorteil der Methode besteht nun darin, daß der Nullpunktsfehler $\Delta \theta$ bei Hoch- oder Tieftemperaturuntersuchungen konstant bleibt. Es müssen somit einzig bei Raumtemperatur zumindest drei Interferenzen vermessen werden, um $a_0(\vartheta_R)$, $\Delta R(\vartheta_R)/R$ und $\Delta \theta$ zu erfassen. Bei tiefen oder hohen Temperaturen genügen

dann zwei Interferenzen für $a_0(\vartheta)$ und $\Delta R(\vartheta)/R$. Die zu jeder Temperatur gehörige Gerade schneidet die Ordinatenachse immer in $-\Delta \theta$. Bleibt auch die Exzentrizität konstant, so fallen die für verschiedene Temperaturen gefundenen Geraden zusammen. Ändert sich die Elektrizität mit der Temperatur, so ändert sich gleichzeitig die Neigung der jeweiligen Geraden.

Als Beispiel sei die graphische Findung der Geraden bei einer großen Zahl von Meßpunkten dargestellt. Abbildung 1 zeigt das Ergebnis für Reineisen bei Raumtemperatur ($\text{CoK}\alpha$ -Strahlung). Als bester Wert für a_0 ist $2,866_5 \text{ \AA}$ anzunehmen. Die Gerade ergibt Werte für $\Delta \theta$ von $0,03_7^\circ$ und für $\Delta R/R$ von $14,7 \cdot 10^{-4}$ oder bei dem gegebenen Goniometerradius von 170 mm eine Exzentrizität von $0,2_5 \text{ mm}$.

Der Abb. 1 liegen die in Tab. 1 angeführten Zahlenwerte zugrunde.

h_i	$2 \theta_i (^\circ)$	$a_i (\text{\AA})$
0 1 1	52,3 ₃	2,870 ₃
0 0 2	77,2 ₄	2,868 ₄
1 1 2	99,7 ₆	2,867 ₃
0 2 2	124,0 ₅	2,866 ₆
0 1 3	161,8 ₇	2,866 ₃

Tab. 1.
 $R = 170 \text{ mm}$,
 $\lambda_{\text{CoK}\alpha} = 1,7902 \text{ \AA}$.

Zum Abschluß noch zwei Bemerkungen:

1. Mit zunehmender Meßgenauigkeit (statistischer Fehler) nimmt gleichermaßen die Schärfe der Aussage, die in Abb. 1 einen deutlichen Unterschied zwischen $a_0 = 2,866_4 \text{ \AA}$ und $a_0 = 2,866_5 \text{ \AA}$ zu machen gestattet, ab. Ähnliches gilt für die Bestimmung der Größen

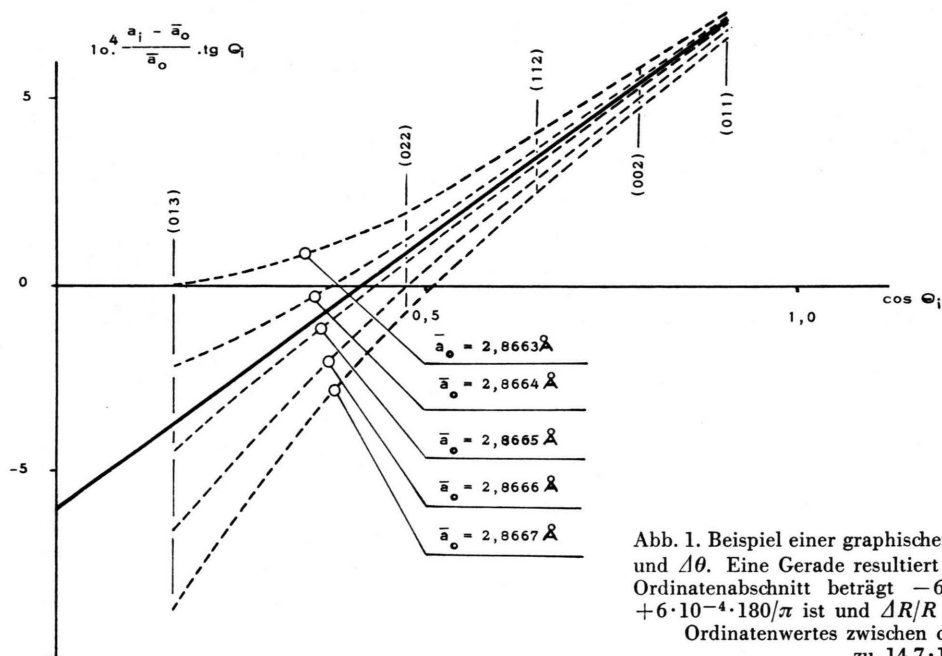


Abb. 1. Beispiel einer graphischen Bestimmung von a_0 , $\Delta R/R$ und $\Delta \theta$. Eine Gerade resultiert für $\bar{a}_0 = a_0 = 2,866_5 \text{ \AA}$. Der Ordinatenabschnitt beträgt $-6 \cdot 10^{-4}$, so daß $\Delta \theta$ gleich $+6 \cdot 10^{-4} \cdot 180/\pi$ ist und $\Delta R/R$ folgt aus der Änderung des Ordinatenwertes zwischen $\cos \theta_i = 0$ und $\cos \theta_i = 1$ zu $14,7 \cdot 10^{-4}$.

$\Delta R/R$ und $\Delta\theta$, die jedoch im allgemeinen nur von sekundärem Interesse sind.

2. Schließlich ist aus Tab. 1 noch zu ersehen, daß trotz der relativ großen Werte von $\Delta R/R$ und $\Delta\theta$ mit den Reflexen bei $124,0_3^\circ$ und $161,8_7^\circ$ eine für die meisten Fälle völlig ausreichende Genauigkeit von $\Delta a/a$

¹ H. EBEL, Z. Angew. Physik **16**, 490 [1964].

$< 10^{-4}$ erzielt wird und sich so die doch eher zeitraubende Prozedur, wie sie hier beschrieben wurde, erspart. Das Auswerteverfahren wird sich also dann anbieten, wenn entweder nur Reflexe bei kleineren Glanzwinkeln gut vermeßbar sind oder aber besonders hohe Anforderungen an die Genauigkeit gestellt werden.

² H. EBEL et al., Z. Angew. Physik **32**, 291 [1971].

Isotherme galvanomagnetische Transportkoeffizienten bei Streuung quasifreier Ladungsträger an Dipolen

J. RACHMANN

Forschungslaboratorien der Siemens AG, München
Deutschland

(Z. Naturforsch. **27 a**, 876–878 [1972]; eingegangen am 10. Februar 1972)

Isothermic Galvanomagnetic Transport Coefficients of Quasi-Free Carriers Scattered at Dipole Centres

It has been observed that in several semiconductors an increase in total impurity concentration leads to an increase in the low-temperature mobility due to pairing effects. The transport coefficients r_H , r_o' and r_o necessary for the analysis of the Hall effect and the magnetoresistance, in the event of dipole scattering, are derived for the cases $ka \gg 3$ and $ka \ll 3$ (k =wave number of the quasi-free charge carrier, a =dipole length). For $ka \gg 3$ the coefficients are dependent on temperature, effective mass, and dipole length, whereas for $ka \ll 3$ they are constant.

Im Jahre 1956 wurde von REISS, FULLER und MORIN¹ eine Erhöhung der Tieftemperaturbeweglichkeit bei Ga-dotiertem Germanium nach Eindiffusion von Li festgestellt. Sie deuteten diesen Effekt als Verminderung des wirksamen Streuquerschnittes der Ga-Störstellen durch die eindiffundierten Li-Atome infolge Paarbildung. Außer bei Elementhalbleitern kann eine erhöhte Beweglichkeit infolge Paarbildung mit Dipolwirkung auch bei Verbindungshalbleitern, wie z. B. den III–V-Verbindungen, auftreten. Eine quantitative Auswertung der gemessenen Temperaturgänge der Hall-Beweglichkeit $\mu_H(T)$ ist nur mit Kenntnis des Hall-Faktors $r_H(T)$ bei Dipolstreuung möglich. Ferner wird für Untersuchungen der magnetischen Widerstandsänderung der entsprechende Koeffizient $r_o'(T)$ benötigt.

Auf eine im thermischen Gleichgewicht befindliche Probe wirke in Längsrichtung ein primäres elektrisches Feld, senkrecht dazu stehe die magnetische Induktion. Dann ergibt sich für einen nichtentarteten Halbleiter mit parabolischer Bandstruktur im Zentrum der Brillouin-Zone unter der Voraussetzung $(\mu_H B_z)^2 \ll 1$:

Hall-Konstante

$$R_H = \frac{r_H}{e} \cdot \frac{\mu_p^2 p - \mu_n^2 n}{(\mu_p p + \mu_n n)^2} \approx - \frac{r_H}{e n}, \quad (1)$$

Sonderdruckanforderungen an Dr. J. RACHMANN, Siemens AG, Zentrale Forschung und Entwicklung, FL 41, D-8000 München 80, Postfach 80 17 09.

magnetische Widerstandsänderung

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(B)} = \left[r_o' \frac{\mu_n^3 n + \mu_p^3 p}{\mu_n n + \mu_p p} - r_H^2 \left(\frac{\mu_n^2 n - \mu_p^2 p}{\mu_n n + \mu_p p} \right)^2 \right] B_z^2 \approx r_o' (\mu_{nH} B_z)^2. \quad (2)$$

Die Ausdrücke bei ambipolarer Leitung vereinfachen sich bei z. B. überwiegender Elektronenleitung wie in den Näherungen angegeben (entsprechend bei überwiegender Löcherleitung). Gesucht sind die von den über die Bänder gemittelten Relaxationszeiten τ der Trägergase abhängigen Koeffizienten

$$r_H \equiv \mu_H / \mu = R_H / \mu \quad \rho(0) = \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2 \quad (3)$$

und

$$r_o' \equiv \langle \tau^3 \rangle / \langle \tau \rangle^3. \quad (4)$$

Die Leitfähigkeits- oder Driftbeweglichkeit ist in Gl. (3) mit μ bezeichnet. Im Falle eines überwiegenden Leitungsmechanismus benutzt man statt Gl. (4) in Gl. (2) besser

$$r_o \equiv \frac{\Delta \rho}{\rho (\mu_H B_z)^2} = \left(\frac{r_o'}{r_H^2} - 1 \right). \quad (5)$$

Die Mittelung der ν -ten Potenz der Relaxationszeit gibt das Integral

$$\langle \tau^\nu \rangle = \frac{4}{3 \pi^{1/2}} \int_0^\infty \tau^\nu(\eta) \eta^{3/2} e^{-\eta} d\eta, \quad (6)$$

wobei $\eta = E/k_0 T$ die reduzierte Energie eines Ladungsträgers bedeutet.

Das übliche Vorgehen bei der Berechnung der Relaxationszeit bei Streuung von Ladungsträgern an Störstellen soll hier kurz skizziert werden (ausführlichere Darstellung siehe z. B. für einzelne ionisierte Coulombsche Störstellen in ²⁻⁵): Aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung erhält man die Streuamplitude in 1. Bornscher Näherung der vom Streupotential auslaufenden Welle. Der differentielle Streuquerschnitt ergibt sich als Betrag des Quadrates der Streuamplitude.

Bei einem Dipolpotential $V(\mathbf{r}) \sim e^2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{r} / \epsilon r^3$ folgt nach Mittelung über den Winkel zwischen Dipolvektor \mathbf{a} und Differenz der Wellenzahlvektoren $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ sowie Integration über den Raumwinkel der totale Streuquerschnitt, der im Falle der vorausgesetzten elastischen Streuung gleich dem elastischen Streuquerschnitt ist (e = Elementarladung, ϵ = Dielektrizitätskonstante, \mathbf{r} = Ortsvektor). Die reziproke Relaxationszeit τ^{-1} ist dann durch das Produkt von Zahl der Streuzentren pro Volumen, thermischer Geschwindigkeit der La-