

Universität zu Köln

Institut für Festkörperphysik

Versuchsprotokoll

B2.2: Überstruktur in Cu_3Au

Autoren: Jesco Talies¹
Timon Danowski²
Durchgefuehrt am: 19.05.2021
Betreuer: Julian Wagner

¹ jtalies@smail.uni-koeln.de, Matrikel-Nr.: 7348338

² tdanowsk@smail.uni-koeln.de, Matrikel-Nr.: 7348629

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Vorbereitung	2
2.1	Reziprokes Gitter	2
2.2	Ordnungsparameter und Phasenübergänge	2
2.3	Überstrukturen	2
2.3.1	<i>CuZn</i>	3
2.3.2	<i>CuAu</i>	3
2.3.3	<i>Cu₃Au</i>	3
2.4	Die röntgenographische Methode	3
2.4.1	Aufbau eines Röntgendiffraktometers	3
2.4.2	Röntgenstrahlung	3
2.4.3	Intensität der gestreuten Röntgenstrahlung	3
2.5	Reflexindizierung im Röntgendiffraktogramm	3
2.6	Die resistive Methode	3
3	Versuchsaufbau	4
4	Auswertung	5
5	Diskussion	5

1 Einleitung

In vielen Legierungen bildet sich zusätzlich zu der Gitterstruktur des Festkörpers eine übergeordnete Struktur, die sogenannte Überstruktur. Sie lässt sich in vergleichsweise makroskopischen Systemen über die Minimierung der Energie erreichen und ist häufig beeinflusst durch Fehlstellen und Deformationen. Diese Überstrukturen lassen sich beeinflussen bzw. erzeugen, sie treten nur unterhalb einer kritischen Temperatur auf, sodass sich durch gezieltes Erhitzen und Abkühlen eines Systems, Proben mit mehr oder weniger Ordnung erzeugen lassen, sodass im resultierenden Spektrum die Unterschiede zu erkennen sind. Im folgenden Versuch werden wir uns genau dieses Phänomen zu nutze machen, indem drei verschieden geordnete Proben miteinander verglichen werden. Dazu wird zunächst die röntgenographische Methode und anschließend die restive verwendet.

2 Theoretische Vorbereitung

2.1 Reziprokes Gitter

Das reziproke Gitter beschreibt in der Festkörperphysik die Röntgen-, Elektronen-, und Neutronenbeugung an Kristallinen Strukturen. Es wird häufig in Zusammenhang mit den Miller'schen Indizes verwendet um die Netzebenen (hkl) zu beschreiben. Es bietet sich an diese im Reziproken zu definieren, da die Länge eines Vektors der die Position eines Gitterpunkts beschreibt gleich dem Reziproken des Abstands der Netzebenen entspricht. Aus den Basisvektoren des Punktgitters ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) ergeben sich über folgende Beziehung die Basisvektoren ($\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$) des Reziproken Gitters.

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}\end{aligned}$$

Über diese Definition der Basisvektoren lassen sich die Koordinaten eines Punktes im reziproken Gitter über die Miller'schen Indizes (hkl) beschreiben.

Bragg Gleichung

Die Bragg Gleichung liefert einen Zusammenhang zwischen dem Netzebenenabstand d_{hkl} und dem Beugungswinkel θ . Damit dieser Zusammenhang gilt muss jedoch der einfallende und gestreute Strahl symmetrisch zur reflektierenden Netzebene verlaufen. Dann lässt sich der Zusammenhang beschreiben durch

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin(\theta) \quad (1)$$

aus dieser lässt sich die äquivalente Laue Bedingung ableiten, welche aussagt, dass ein Röntgenstrahl genau dann gestreut wird, wenn der Beugungsvektor \vec{k} gleich dem reziproken Gittervektor ist.

2.2 Ordnungsparameter und Phasenübergänge

Bei einem Phasenübergang handelt es sich um eine Umwandlung einer Phase eines Stoffes in eine andere Phase. Diese Übergänge treten meist in Abhängigkeit von einem oder mehreren Zustandsvariablen wie Druck oder Temperatur auf.

Will man nun den Zustand eines physikalischen Systems nicht nur vor und nach einem Übergang beschreiben, so dienen die Ordnungsparameter zur eben dieser. Geht man beispielsweise von einem Übergang von einer flüssigen in eine feste Phase, wie beispielsweise bei Gefrierung von Wasser, so geht das System von einer hohen Symmetrie in eine Phase in der lediglich die Gittersymmetrie verbleibt. Dieser Übergang lässt sich anhand des Ordnungsparameters als Übergang von absoluter Unordnung ($s = 0$) zu einer höheren Ordnung ($s = c \in \mathbb{R}^+$) beschreiben. Diese Beschreibung lässt sich auf beliebige Übergänge übertragen, bei denen gegebenenfalls kein eindeutiger Phasenwechsel auftritt, ja nach dem verändert sich der Ordnungsparameter entweder plötzlich oder kontinuierlich. Anhand der Thermodynamik lässt sich über

$$F = E - TS \quad (2)$$

zeigen, dass der Ordnungsparameter stets versucht die freie Energie zu minimieren um schlussendlich einen Gleichgewichtszustand mit minimaler freier Energie zu erreichen.

2.3 Überstrukturen

Eine Überstruktur beschreibt eine Elementarzelle die größer ist als diejenige die man beim Durchschneiden des Kristallgitters erhalten würde. Nimmt man beispielsweise eine reine Oberfläche/Kristalline Struktur an, so gäbe es keine Überstrukturen, diese kommen erst dann zustande wenn beispielsweise Adsorbatome an einer Oberfläche ein weiteres geordnetes Gitter bilden welches größer ist als das des reinen ursprünglichen Gitters. Überstrukturen werden nach Wood, über ein vielfaches der reziproken Gittervektoren angegeben, beispielsweise

(2×1) die Überstruktur ist in x-Richtung doppelt so groß wie die Elementarzelle
($\sqrt{2} \times \sqrt{2}$) 45° um 45° rotierte quadratische Zelle

Überstrukturen lassen sich beispielsweise direkt mit dem Rastertunnelmikroskop sichtbar gemacht werden. Andererseits lässt sich über Beugungsverfahren das reziproke Gitter der Oberfläche abbilden, bei der die Überstruktur zu zusätzlichen Gitterpunkten im reziproken Gitter in Form von zusätzlichen Beugungsmaxima führt.

2.3.1 $CuZn$

2.3.2 $CuAu$

2.3.3 Cu_3Au

2.4 Die röntgenographische Methode

2.4.1 Aufbau eines Röntgendiffraktometers

2.4.2 Röntgenstrahlung

2.4.3 Intensität der gestreuten Röntgenstrahlung

2.5 Reflexindizierung im Röntgendiffraktogramm

2.6 Die resistive Methode

3 Versuchsaufbau

4 Auswertung

5 Diskussion