



Die Ressourcenuniversität. Seit 1765.

Melanie Nentwich

Institut für Angewandte Analysis (PD Dr. S. Bernstein)

Institut für Experimentelle Physik (Dipl.-Phys. M. Zschornak)

TU Bergakademie Freiberg



## Strukturbestimmung ausgewählter Selten-Erd-Verbindungen unter Nutzung der DAFS-Methode

30. November 2012

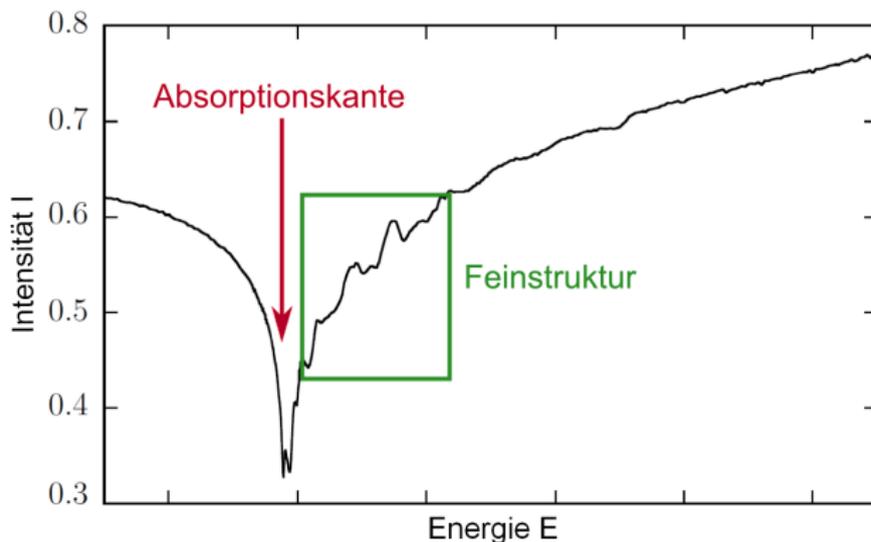
Jahresmitgliederversammlung

Freunde und Förderer der TU Bergakademie Freiberg e. V.



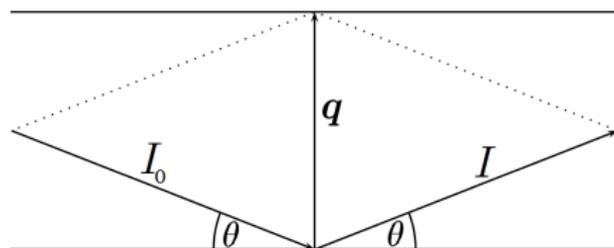
# Die Methode

- DAFS – Diffraction Anomalous Fine Structure
- energieabhängige ( $E$ ) und reflexabhängige ( $q$ ) Röntgenbeugung an Absorptionskanten zur Ermittlung der Feinstruktur
- theoretische Approximation mit bzw. ohne Oszillationen möglich



# Die Methode

- Informationen über:
  - ⇒ Abstände
  - ⇒ Atomarten
  - ⇒ Koordinationszahlen



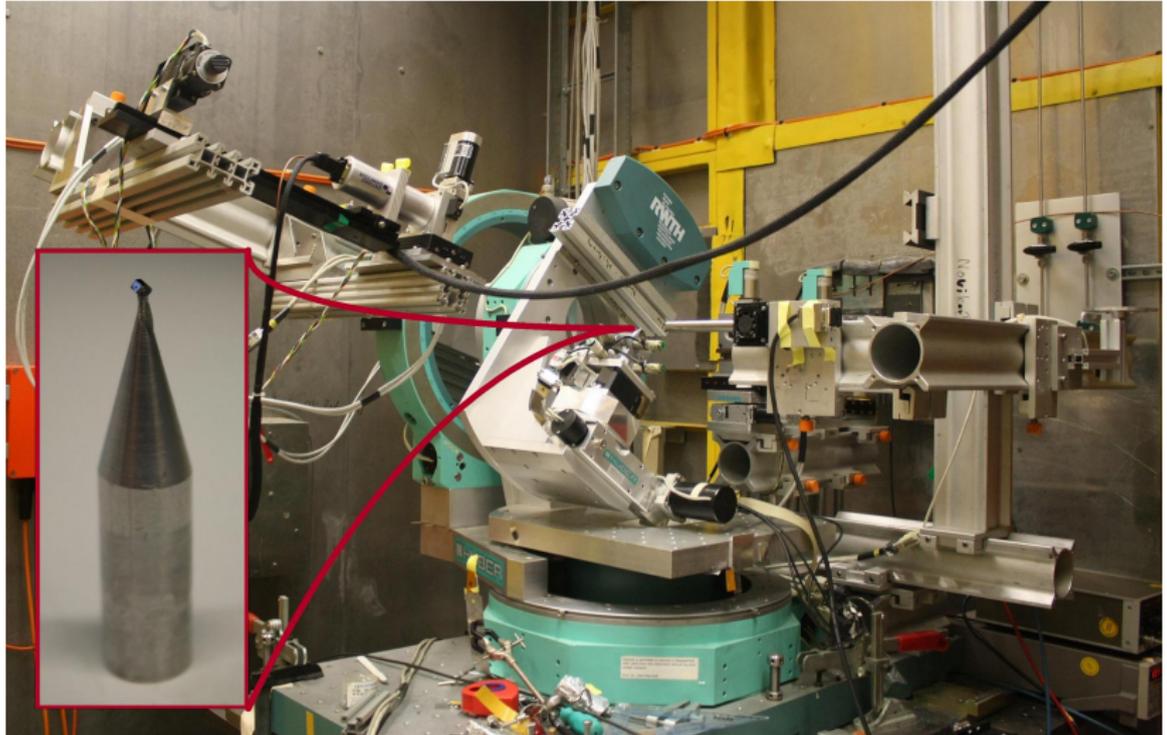
- Voraussetzung: Bragg-Gleichung erfüllt

$$\frac{1}{E} \propto \lambda = 2d \sin \theta, \quad d = |\mathbf{q}|^{-1}$$

- Messung der gestreuten Intensität  $I$  ( $\mathbf{q}$  konstant,  $E$  variabel)
- Berechnung des kristallographischen Strukturfaktors  $|F(\mathbf{q}, E)|^2 \propto I$

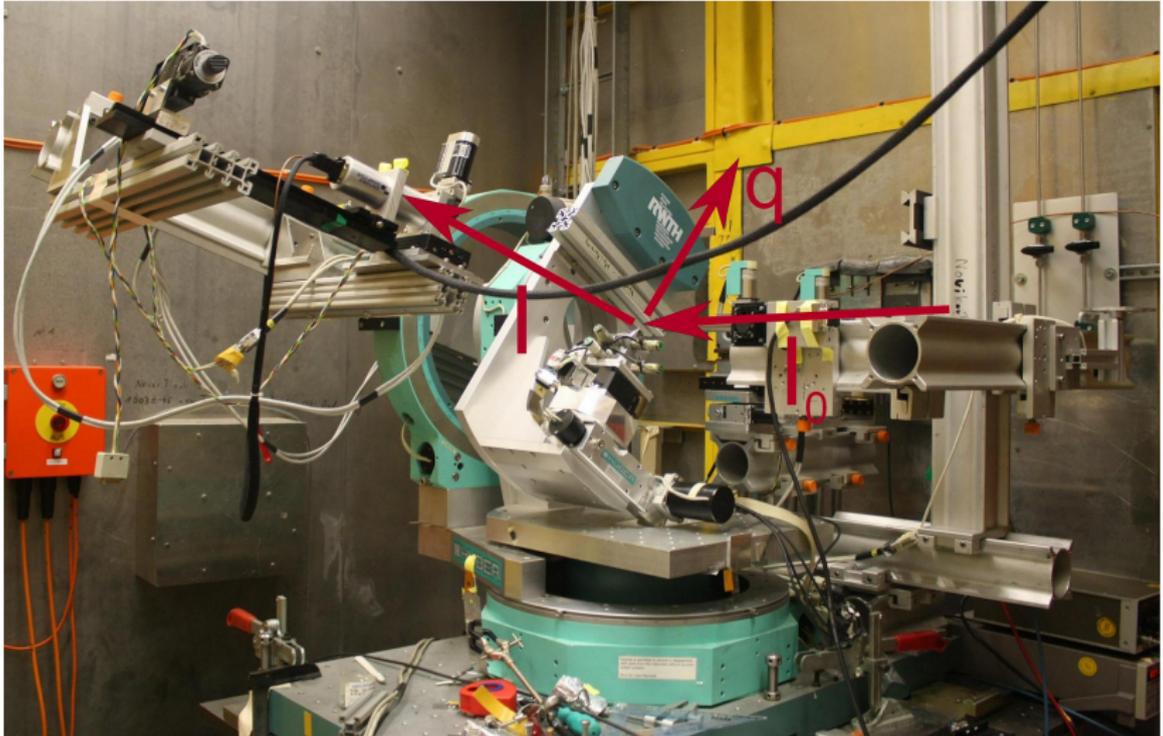
$$F(\mathbf{q}, E) = \sum_{\mu=0}^{N-1} f_{\mu}(\mathbf{q}, E) \exp(2\pi i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}(\mu))$$

# Die Methode



Goniometer an Beamline E2 von DORIS III, HASYLAB bei DESY

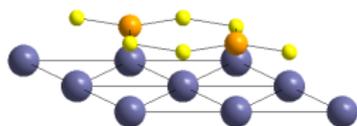
# Die Methode



Goniometer an Beamline E2 von DORIS III, HASYLAB bei DESY

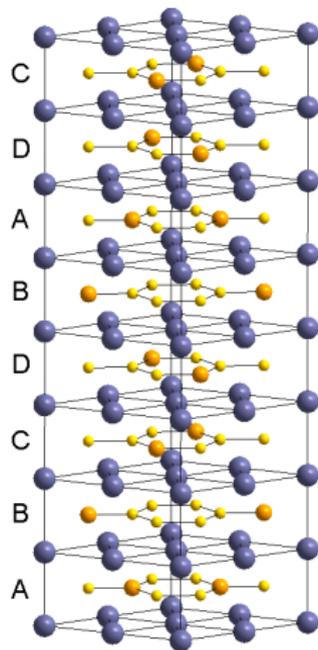
# Das Stoffsystem – Holmium-Palladium-Silizium $\text{Ho}_2\text{PdSi}_3$ <sup>1, 2</sup>

- Basisstruktur  $\text{HoSi}_2$ , hexagonal, Raumgruppe  $P6/mmm$  (191)
- Substitution von Si durch Pd
  - ⇒ kommensurable Modulation (Überstruktur)
  - ⇒ Ausprägung von isomorphen Schichten A, B, C, D



( $2 \times 2 \times 1$ )-Supercelle A

- ⇒ Stapelung zu äquivalenten Supercellen  $D_1, \dots, D_6$



( $2 \times 2 \times 8$ )-Supercelle  $D_1$



<sup>1</sup>F. Tang et al. 2011, doi: 10.1103/PhysRevB.84.104105

<sup>2</sup>T. Leisegang 2010, isbn: 978-3-86012-399-7

$$F(\mathbf{q}, E) = \sum_{\mu=0}^{N-1} f_{\mu}(\mathbf{q}, E) \exp(2\pi i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}(\mu))$$

- Darstellung als Superzelle

- ⇒ neue Elementarzelle umfasst  $2 \times 2 \times 8$  alte Basiszellen
- ⇒ Strukturfaktor: Summation über mehr Atome pro Zelle

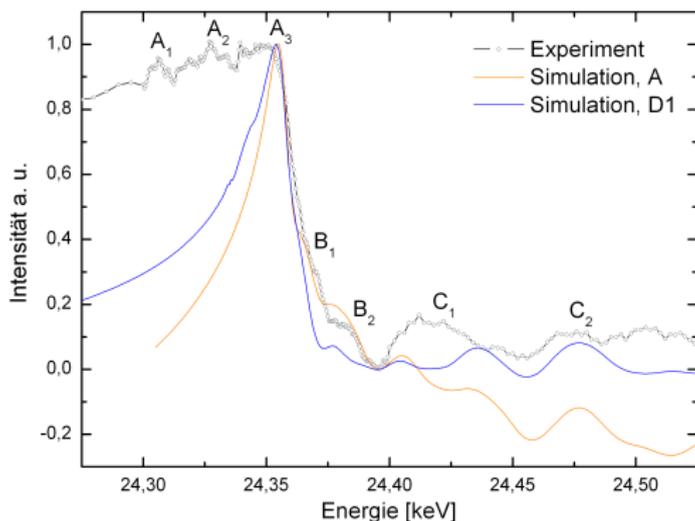
- Darstellung mit Modulationsvektoren

- ⇒ höherdimensionale Betrachtung
- ⇒ Modulationsfunktion  $\mathbf{m}$  über bis zu drei Modulationsvektoren (hier:  $\mathbf{a}_4^* = 1/2 \mathbf{a}_1^*$ ,  $\mathbf{a}_5^* = 1/2 \mathbf{a}_2^*$ ,  $\mathbf{a}_6^* = 1/8 \mathbf{a}_3^*$ )
- ⇒ Erweiterung des Strukturfaktors um Modulationsanteil

$$g_{\mu}(\mathbf{q}, l) = \int_0^1 \exp(2\pi i l \tau) \exp(2\pi i \mathbf{q} \mathbf{m}(\tau)) d\tau$$

# Die Resultate

## exemplarisch für die Pd-*K*-Kante und 301-Reflex



- Vorkantenfeatures A im Modell  $D_1$  sichtbar, jedoch nicht in  $A$
- Kantenfeatures B in beiden Modellen
- Nachkantenfeatures C gleichermaßen angenähert, bessere Tendenz in Modell  $D_1$

⇒ bessere Übereinstimmung von Modell  $D_1$  mit Experiment

# Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Dank an:

- PD Dr. Swanhild Bernstein
- Dipl.-Phys. Matthias Zschornak
- Dipl.-Phys. Carsten Richter
- Dr. Dmitri Novikov
- Prof. Dr. Dirk C. Meyer



Ich danke dem DESY für die Bereitstellung der Strahlzeiten.