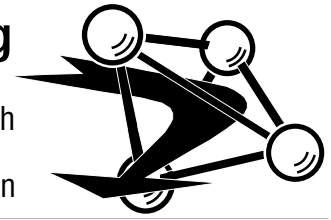

Laboratorium für Neutronenstreuung

ETH

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

PSI

Paul Scherrer Institut Würenlingen & Villigen



Physik-Praktikum für Vorgerückte an der ETH Zürich

Nachweis antiferromagnetischer Fernordnung mittels Neutronendiffraktion

Antiferromagnetische Fernordnung soll mittels Neutronendiffraktion in einer polykristallinen Probe der Verbindung Mangansulfid MnS oder Manganoxid MnO nachgewiesen werden.

Das von Ihnen durchzuführende Experiment ist eines der Neutronendiffraktionsexperimente, die von Shull zwischen 1946-51 durchgeführt wurden und für die er 1994 mit dem Nobelpreis geehrt wurde!

Januar 2005

Inhaltsverzeichnis

- 1. Vorwort zum Praktikum und Literaturhinweise**
- 2. Kristallographische Grundlagen**
- 3. Einführung in den Magnetismus**
- 4. Grundlagen der Neutronenstreuung**
 - 4.1. Eigenschaften des Neutrons
 - 4.2. Elastische kohärente Streuung
 - 4.2.1. Nukleare Streuung
 - 4.2.2. Magnetische Streuung
 - 4.2.3. Kombinierte elastische nukleare und magnetische Streuung
- 5. Aufgabenstellung des Praktikumsversuches**
 - 5.1. Informationen über Mangansulfid MnS
 - 5.2. Aufgaben zur Vorbereitung des Experimentes
- 6. Spezielle Betrachtungen anhand von Mangansulfid MnS**
- 7. Experimentelle Methoden**
 - 7.1. Pulvermethoden
 - 7.2. Einkristallmethoden
- 8. Durchführung des Experimentes**
 - 8.1. Das Pulverdiffraktometer HRPT
 - 8.2. Durchführung des Experimentes
 - 8.3. Aufgaben während des Experimentes

Anhang A: Atomformfaktor von Mn²⁺

Anhang B: Verbindungen Zürich-Paul Scherrer Institut (West)

Anhang C: Lageplan des PSI West

Anhang D: Instrumentenlageplan der Neutronenquelle SINQ

1. Vorwort zum Praktikum und Literaturhinweise

Die vorliegende Praktikumsbeschreibung soll eine Hilfe für die Vorbereitung des Neutronenexperimentes darstellen. Teilweise wird Bekanntes aus der Vorlesung “Neutronenstreuung in der Festkörperphysik” (ETHZ, Dr. J. Mesot) in einzelnen Kapiteln zusammengefasst. Darüber hinaus werden die für das Experiment notwendigen kristallographischen Grundlagen in kurzer Form dargestellt und auf weiterführende Literatur verwiesen.

Um die Durchführung des Experimentes zu regeln, ist mit einer der folgenden Personen am Laboratorium für Neutronenstreuung ETHZ & Paul Scherrer Institut, 5232 Villigen PSI, Kontakt aufzunehmen.

<i>Name</i>	<i>Telefon</i>	<i>Gebäude/Raum</i>	<i>e-mail</i>
V. Pomjakushin	056-310 20 94	WHGA/133	Vladimir.Pomjakushin@psi.ch
L. Keller	056-310 40 07	WHGA/135	Lukas.Keller@psi.ch

Für besonders Interessierte sei insbesondere für die Vorbereitung des Praktikums auf folgende Literatur hingewiesen:

- ☞ Ch. Kittel “Einführung in die Festkörperphysik”, 9. Auflage, Oldenburg Verlag München, Wien (1991)
- ☞ N.W. Ashcroft, N.D. Mermin “Solid State Physics”, International Edition, Saunders College Publishing (1976)
- ☞ W. Kleber “Einführung in die Kristallographie” Verlag Technik Berlin (1990)
- ☞ G.E. Bacon “Neutron Diffraction” Clarendon Press Oxford (1975)
- ☞ G.L. Squires “Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering” Cambridge University Press (1978)

2. Kristallographische Grundlagen

Kondensierte Materie kommt im festen Zustand amorph (glasartig), quasikristallin oder kristallin vor. Im Folgenden werden ausschliesslich kristalline Festkörper (Kristalle) besprochen. Zur vertiefenden Lektüre sei auf P. Paufler “Kristallographische Grundbegriffe der Festkörperphysik” Akademie-Verlag Berlin (1975) hingewiesen.

Das wesentliche Merkmal eines Kristalls ist eine regelmässige Verteilung der Atomkerne und Elektronen, die Kristallstruktur. Für die meisten physikalischen Eigenschaften (z.B. elektrische Leitfähigkeit, thermische Ausdehnung, optische Eigenschaften, Kompressibilität) hat die Existenz der Kristallstruktur eine Richtungsabhängigkeit zur Folge. Von der Idealstruktur eines Kristalls wird gesprochen, wenn von den Störungen der Kristallstruktur, zu denen auch die Oberfläche gehört, abstrahiert wird. Unter ihren Symmetrieeigenschaften hat für physikalische Betrachtungen die Translationssymmetrie die weitestreichenden Konsequenzen. Sie bedeutet, dass jede Struktureinheit (z.B. Atomkern, Ion, Molekül) durch Verschiebung um einen Vektor beliebig oft mit einer gleichen Struktureinheit zur Deckung gebracht werden kann. Wird in einer beliebigen experimentell ermittelten räumlichen Kristallstruktur ein periodisch wiederholtes Motiv derart durch einen Punkt ersetzt, dass sich eine Anordnung mit für jeden Punkt identischer Umgebung ergibt, erhält man das Kristallgitter der Kristallstruktur. Das Gitter ist also eine geometrische Abstraktion. Besteht das Motiv aus mehr als einem Atom, so heisst es Basis des Gitters. Nach A. Bravais sind alle denkbaren Strukturen durch eines von insgesamt 14 verschiedenen Gittern, sogenannten Bravais-Gittern, darstellbar. Die grundlegende Symmetrieeigenschaft des Gitters und damit auch der Struktur ist die Invarianz gegen Translation in jeder Richtung (Translationsgitter), die mindestens zwei Gitterpunkte miteinander verbindet. Dabei ist die unendliche Ausdehnung eines idealen Kristalls vorausgesetzt.

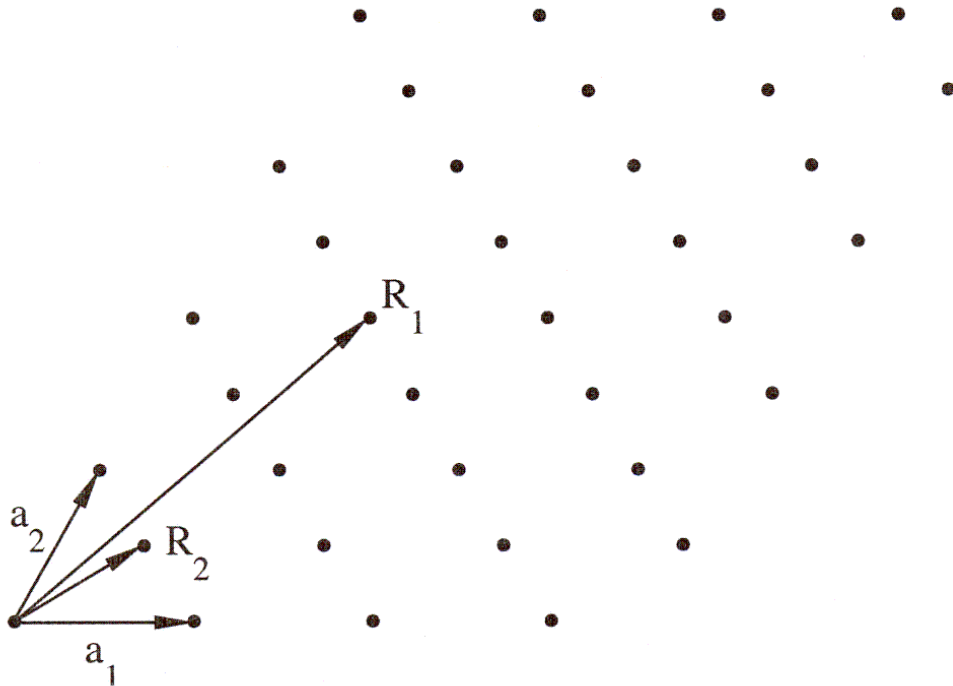
Es seien $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ drei nichtkomplanare Vektoren, die nach Betrag und Richtung die Translation von einem Gitterpunkt zum nächsten entlang dreier verschiedener Punktreihen darstellen. Dann beschreibt der Vektor

$$\mathbf{R} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3 \quad (1)$$

auch die Lage anderer, nicht auf den genannten Punktreihen liegenden Gitterpunkte in Bezug auf einen willkürlich als Ursprung des Koordinatensystems ausgewählten. Figur 1 gibt ein Beispiel zur Beschreibung der Lage von Gitterpunkten in einem zweidimensionalen Raum. Die Vektoren \mathbf{a}_i können so festgelegt werden, dass alle Gitterpunkte mit ganzzahligen u, v, w beschrieben werden können. Das von den Vektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ aufgespannte Parallelepipid heisst Elementarzelle des Gitters, da aus ihm das gesamte Kristallgitter durch periodische Wiederholung dargestellt werden kann. Obwohl die Wahl der \mathbf{a}_i willkürlich erfolgen kann, wird aus Gründen der Zweckmässigkeit (Orthogonalität der \mathbf{a}_i , Übereinstimmung von Symmetrieelementen mit den \mathbf{a}_i und Konvention) international eine einheitliche Wahl der \mathbf{a}_i für alle 14 Bravais-Gitter bevorzugt. Koordinatenursprung ist jeweils ein Gitterpunkt. Unterschiedliche kristalline Phasen mit gleichem Gitter (gleicher oder verschiedener Struktur) unterscheiden sich bei gleicher Wahl der \mathbf{a}_i/a_i im Allgemeinen noch durch die Beträge der \mathbf{a}_i , die sogenannten Gitterkonstanten, und/oder durch die Winkel zwischen den \mathbf{a}_i . Das Volumen der Elementarzelle beträgt

$$V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3). \quad (2)$$

Für ein Rechtssystem der Vektoren \mathbf{a}_i ist $V > 0$, für ein Linkssystem wird $V < 0$. In der Regel wird ein Rechtssystem benutzt. Werden die \mathbf{a}_i so gewählt, dass die Dichte der Gitterpunkte $\rho_{\text{GP}} = 1/V$, heissen die Elementarzelle und das Vektortripel \mathbf{a}_i primitiv. In diesem Falle enthält die Elementarzelle einen Gitterpunkt. Es gibt sieben nicht primitive Bravais-Gitter.



$$\mathbf{R}_1 = 1\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{R}_2 = 1\frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2$$

Fig. 1: Zur Beschreibung der Lage von Gitterpunkten

Besonders für physikalische Anwendungen hat sich ein Hilfsbegriff zum Kristallgitter bewährt: das reziproke Gitter. Insbesondere bei Neutronenstreuexperimenten “denkt” man im reziproken Gitter, weil sich die Wirkungsquerschnitte darauf beziehen (siehe Gleichung 13, 15 und 16). Das ursprüngliche Gitter wird dann oft vom reziproken durch die Bezeichnung Raumgitter unterschieden. Zu einem Raumgitter sei ein primitives Vektortripel \mathbf{a}_i bekannt. Dann wird das zugehörige primitive reziproke Vektortripel \mathbf{a}_k^* , d.h. die Elementarzelle des reziproken Gitters, durch die folgende Beziehung definiert:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_k^* = \delta_{ik} \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases} \quad i, k = 1, 2, 3 \quad (3)$$

Diese Bedingung wird erfüllt von den Vektoren

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^* \text{ zyklisch.} \quad (4)$$

Gleichung (4) macht deutlich, dass die \mathbf{a}_k^* nur für nicht-koplanare \mathbf{a}_i ein Gitter aufspannen. Figur 2 veranschaulicht die relative Orientierung von reziprokem Gitter und Raumgitter.

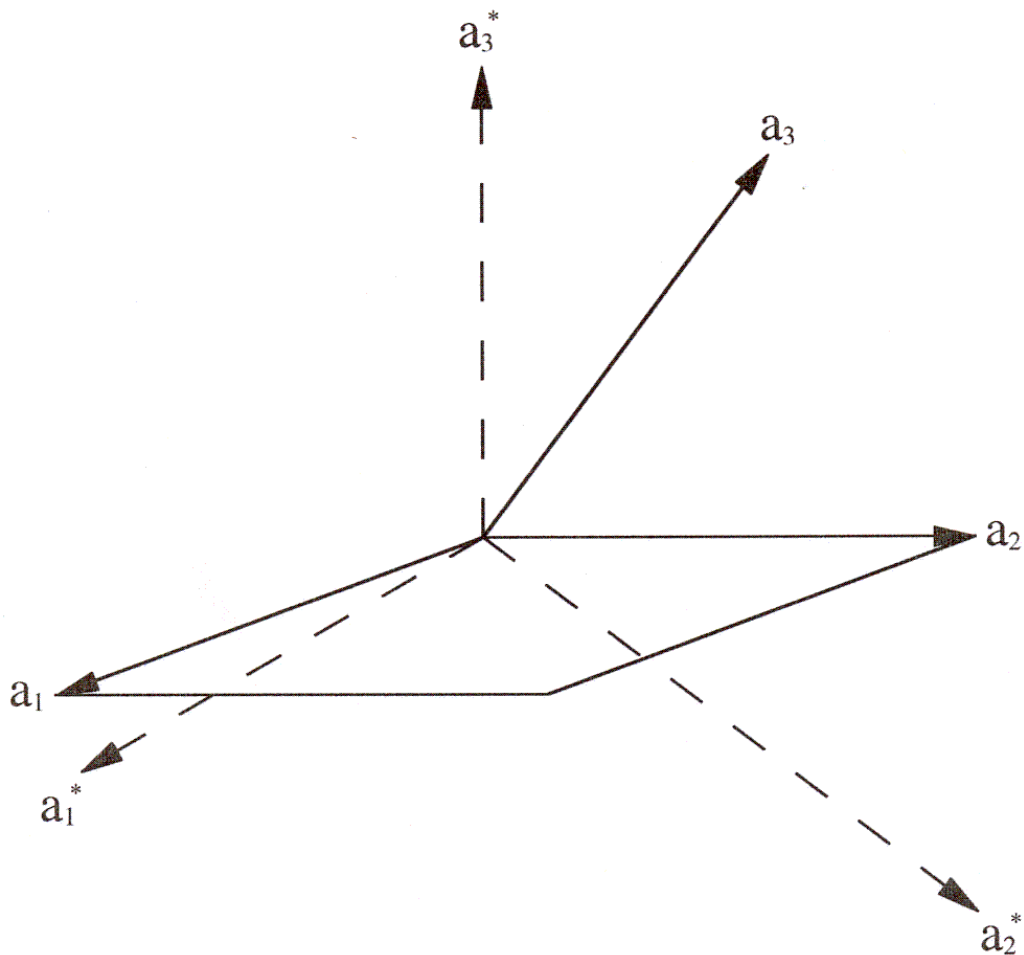


Fig. 2: Relative Orientierung von reziprokem Gitter und Raumgitter

Die durch \mathbf{a}_k^* definierten Punkte einer Elementarzelle des reziproken Gitters sind ebenso der Forderung nach strenger Translationssymmetrie zu unterwerfen, wie die Gitterpunkte des Raumgitters. Die Wahl des Koordinatenursprungs in diesem reziproken Gitter ist dann wieder willkürlich. Ein beliebiger Punkt des reziproken Gitters kann analog zur Gleichung (1) durch den Vektor

$$\boldsymbol{\tau}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^* \quad (5)$$

mit drei ganzen Zahlen h , k und l beschrieben werden. Für nicht primitive \mathbf{a}_i bzw. \mathbf{a}_k^* sind die h , k , l rationale Zahlen. Gleichung (3) lässt unmittelbar erkennen, dass die Vektoren des reziproken Gitters \mathbf{a}_k^* jeweils senkrecht auf denjenigen beiden des Raumgitters stehen, die nicht die gleichen Indizes besitzen, d.h. $\mathbf{a}_1^* \perp \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ usw. Die Vektoren des reziproken Gitters stehen senkrecht auf Netzebenen des Raumgitters. Diese für die Anwendung bedeutsame Eigenschaft gilt allgemein für beliebige Gittervektoren $\boldsymbol{\tau}_{hkl}$ nach Gleichung (5), wobei $\boldsymbol{\tau}_{hkl}$ gerade die Normale der speziellen Raumgitter-Netzebene mit den Indizes (hkl) bildet:

$$\boldsymbol{\tau}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^* \perp (hkl).$$

Auch der Betrag $\boldsymbol{\tau}_{hkl}$ im reziproken Gitter steht in einfacher Beziehung zum Raumgitter. Er ist nämlich gleich dem Kehrwert des Netzebenenabstands d der Ebenen (hkl)

$$|\boldsymbol{\tau}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}. \quad (6)$$

An dieser Stelle wird darauf hingewiesen, dass leider die Definition des reziproken Gitters [Gleichung (3)] von Kristallographen und Physikern nicht gleich gehandhabt wird. Der Unterschied besteht in einem Faktor von 2π , der auf der rechten

Seite von Gleichung (3) in manchen Büchern erscheint. Da beide Definitionen, also die mit und die ohne den Faktor von 2π , ihre Berechtigung haben, ist mit einer Vereinheitlichung nicht zu rechnen. Ein Faktor von 2π ist ebenso in Gleichung (6) zu berücksichtigen.

Der Vorteil, den die Verwendung des Begriffs des reziproken Gitters bei allen Interferenzproblemen am Kristallgitter bietet, beruht auf der Abbildung von Netzebenen auf Punkte. Wir betrachten die Streuung einer in Richtung des Einheitsvektors \mathbf{k}_i auf eine Netzebene (hkl) auffallende Welle der Wellenlänge λ (Fig. 3). In Richtung der Sekundärwellen mit dem Wellenvektor \mathbf{k}_f wird dann eine Verstärkung der gestreuten Wellen auftreten, wenn ihre Phasendifferenz ein ganzzahliges Vielfaches von 2π erreicht, d.h.

$$-\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) = \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q} = 2\pi n. \quad (7)$$

- \mathbf{k}_i : Wellenvektor der einfallenden Neutronen
- \mathbf{k}_f : Wellenvektor der gestreuten Neutronen
- $\boldsymbol{\tau}_{hkl}$: reziproker Gittervektor
- \mathbf{Q} : Streuvektor
- \mathbf{R} : Abstandsvektor zweier Atome bzw. Streuzentren
- n : ganze Zahl

Diese Bedingung [Gleichung (7)] ist erfüllt, wenn \mathbf{Q} gleich einem reziproken Gittervektor $\boldsymbol{\tau}_{hkl}$ ist. Unter Zuhilfenahme von Gleichung (6) und den folgenden Gleichungen

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = \boldsymbol{\tau}_{hkl} \quad (8)$$

$$|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (9)$$

erhalten wir

$$\mathbf{k}_i \cdot \sin\Theta = \frac{\mathbf{Q}}{2} \quad (10)$$

$$2d_{hkl} \cdot \sin\Theta = \lambda. \quad (11)$$

2Θ : Streuwinkel

Andererseits ergibt die Bedingung für konstruktive Interferenz der an verschiedenen Netzebenen gestreuten Wellen

$$2d_{hkl} \cdot \sin\Theta = n\lambda. \quad (12)$$

Gleichung (12) wird auch als Bragg-Gesetz bezeichnet. Aus diesem Gesetz folgt, dass das Kristallgitter die Positionen der Bragg-Reflexe im elastischen Spektrum bestimmt.



Fig. 3: Das Bragg-Gesetz im reziproken Raum (links). Beziehung zwischen \mathbf{k}_i und \mathbf{k}_f zu den Netzebenen (gestrichelte Linien) bei Bragg-Streuung (rechts).

3. Einführung in den Magnetismus

Paramagnetismus kondensierter Materie wird durch atomare magnetische Momente infolge ungepaarter 2p-, 3d-, 4d-, 5d-, 4f- und 5f-Elektronen verursacht. Im paramagnetischen Zustand besteht keine Korrelation in der Orientierung der atomaren magnetischen Momente: man spricht von einem ungeordneten Zustand. Wegen Austauschwechselwirkungen quantenmechanischen Ursprungs zwischen den magnetischen Atomen bzw. Ionen treten bei genügend tiefen Temperaturen Ordnungsphänomene in Form von Überstrukturen magnetischer Momente auf. So sind im ferromagnetischen Zustand innerhalb einer magnetischen Domäne alle Momente parallel ausgerichtet ($\uparrow\uparrow$). Beim Antiferromagneten existieren mindestens zwei Untergitter mit antiparalleler Momentorientierung ($\uparrow\downarrow$). Bei Ferrimagneten (z.B. Ferriten) existiert ein resultierendes ferromagnetisches Moment ($\uparrow\downarrow$) trotz antiferromagnetischer Kopplungen. Solche Axialvektorkonfigurationen magnetischer Momente können mit der "chemischen" Struktur kommensurabel sein; das Volumen der magnetischen Elementarzelle ist dann ein ganzzahliges Vielfaches der chemischen Elementarzelle. Durch Neutronenbeugung konnte auch die Existenz inkommensurabler magnetischer Strukturen wie Spiralkonfigurationen und modulierte Strukturen nachgewiesen werden. Im Zusammenhang mit grundlegenden Arbeiten auf den Gebieten des Anti- und Ferrimagnetismus erhielt L. Néel im Jahre 1970 den Nobelpreis für Physik. Bereits 1951 gelang durch Shull am Beispiel von MnO in Oak Ridge (USA) der direkte experimentelle Nachweis antiferromagnetischer Fernordnung mittels Neutronenbeugung. In Fig. 4 sind einige Beispiele für ausgewählte Spinanordnungen und die entsprechenden Simulationen der Neutronendiffraktogramme dargestellt. Ein Charakteristikum der antiferromagnetischen Ordnung besteht darin, dass die magnetischen Bragg-Linien bei anderen Streuwinkeln als die nuklearen Bragg-Linien auftreten.

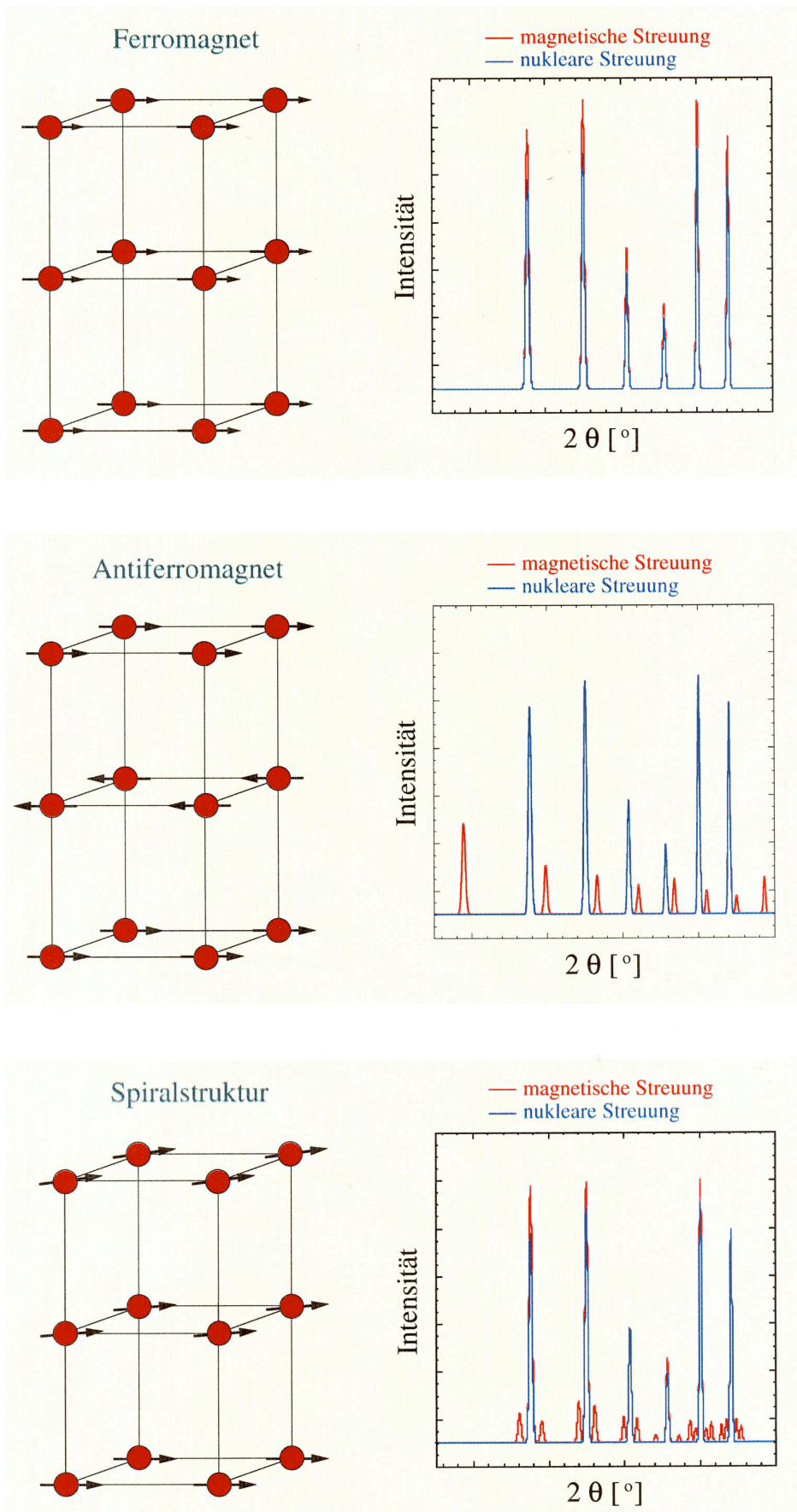


Fig. 4: Beispiele magnetischer Strukturen (links: Spinanordnung, rechts: Neutronendiffraktogramm)

4. Grundlagen der Neutronenstreuung

[Auszugsweise aus S. Rosenkranz, Dissertation (1996) LNS-189]

Das Neutron wurde 1932 von Chadwick aufgrund von Ungereimtheiten in der Interpretation der Eigenschaften ionisierender Teilchen, die durch Alpha-Bestrahlung von Beryllium entstehen, postuliert. Schon zwei Jahre später startete Fermi eine Reihe von Untersuchungen der durch Neutronenbestrahlung induzierten Radioaktivität, und 1936 erschien seine Methode des Pseudo-potentials für die Beschreibung der Streuung von Neutronen an Kernen in Festkörpern, die auch heute noch die Grundlage der Interpretation der nuklearen Neutronenstreuung ist. Zur selben Zeit wurde von Bloch vorhergesagt, dass die elektromagnetische Neutron-Elektron Streuung von derselben Größenordnung wie die nukleare Streuung ist. Der praktische Gebrauch der Neutronenstreuung zur Untersuchung der Eigenschaften von Festkörpern wurde erst mit der Entwicklung von Atomreaktoren, wie dem Oak Ridge Reaktor 1943 und dem CP-3 Reaktor am Argonne National Laboratory 1944, möglich. Seither hat sich die Neutronenstreuung zu einer vielfältigen experimentellen Methode zur Untersuchung der mikroskopischen Eigenschaften kondensierter, flüssiger und auch gasförmiger Materie entwickelt und findet interdisziplinär Anwendung in verschiedenen Gebieten wie Festkörperphysik, Chemie, Biologie und Materialwissenschaften. Die Vielseitigkeit dieser Technik beruht direkt auf den Eigenschaften des Neutrons, die im folgenden Abschnitt zusammengefasst sind. Die weiteren Abschnitte dieses Kapitels behandeln kurz die für den Praktikumsversuch wichtigen Neutronenquerschnitte. Die grundlegenden Konzepte des Streuformalismus sind in allen Lehrbüchern der Quantenmechanik enthalten, und eine detaillierte Herleitung der Streuquerschnitte ist in verschiedenen Lehrbüchern der Neutronenstreuung zu finden. Folgende Literatur sei speziell hierzu empfohlen:

- ☞ A. Messiah “Quantum mechanics” North-Holland, Amsterdam (1978)
- ☞ G. Baym “Lectures on Quantum Mechanics” Benjamin/Cummings Menlo Park (1974)

- ☞ G.L. Squires “Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering” Cambridge University Press (1978)
- ☞ G.E. Bacon “Neutron Diffraction” Clarendon Press Oxford (1975)
- ☞ S.W. Lovesey “Theory of neutron scattering from condensed matter” Clarendon Press Oxford (1984)

4.1. Eigenschaften des Neutrons

Die Neutronen werden heute entweder durch Spaltung von Atomkernen (Fission) oder Anregung schwerer Kerne mittels hochenergetischer Protonen mit anschließender Neutronenemission (Spallation) produziert. Die Neutronen werden entsprechend ihrer Energie eingeteilt.

Energiebereich	Bezeichnung
< 0.5 meV	ultrakalt
0.5 ... 5 meV	kalt
5 ... 100 meV	thermisch
100 meV ... 1 eV	epithermisch

Für die Neutronenstreuung von Interesse sind insbesondere die thermischen Neutronen, d.h. Neutronen mit kinetischer Energie im Bereich meV, die einige einzigartige Eigenschaften besitzen:

- ☺ Das Neutron ist elektrisch neutral und durchdringt problemlos Materie von einigen Zentimetern Dicke. Bei der Interpretation der Experimente treten deshalb keine Probleme durch Oberflächeneffekte auf. Die grosse Eindringtiefe ermöglicht auch eine vergleichsweise einfache Realisierung von speziellen experimentellen Bedingungen wie Druck, tiefe und hohe Temperaturen sowie Magnetfelder.

- ☺ Das Neutron wird mittels der starken Wechselwirkung an den Atomkernen gestreut im Gegensatz, und insbesondere komplementär, zur Röntgenstreuung, wo das Photon an den Elektronen gestreut wird.
- ☺ Die Streuung eines thermischen Neutrons an einem Kern ist isotrop, und die Streulänge variiert unkorreliert von Isotop zu Isotop. Die leichten Atome sind deshalb experimentell genau so gut zugänglich wie die schweren im Gegensatz zur Röntgenstreuung, wo die Streulänge direkt proportional zur Anzahl Elektronen ist.
- ☺ Das Neutron besitzt ein magnetisches Moment und streut mittels der magnetischen Dipol-Dipol Wechselwirkung auch an magnetischen Momenten im Festkörper. Der Vektorcharakter der Dipol-Dipol Wechselwirkung ermöglicht zudem eine direkte Bestimmung der Richtung der magnetischen Momente.
- ☺ Durch die Masse des Neutrons ($m_n=1.675 \cdot 10^{-27}$ kg) ist mit der thermischen Neutronenstreuung als einziger experimenteller Methode der gesamte Energie-Impulsbereich ($E \sim 0-1$ eV, $Q \sim 0-50 \text{ \AA}^{-1}$) fundamentaler dynamischer Prozesse (Phononen, Spinwellen) zugänglich.
- ☺ Die kleinere Energie thermischer Neutronen erlaubt im Vergleich zu ionisierender Strahlung eine zerstörungsfreie Untersuchung insbesondere auch von biologischen Präparaten.

Neben all den Vorteilen haben einige der Eigenschaften des Neutrons aber auch nachteilige Konsequenzen:

- ☹ Für die Herstellung des Neutronenstrahles sind grosse Installationen notwendig, die teuer (Protonen-Beschleuniger für die Spallation) und/oder politisch problematisch (Kernreaktor) sind. Die Anzahl existierender Neutronenquellen ist deshalb klein und der Zugang beschränkt. Die Experimente müssen lange im Voraus geplant werden und sind teilweise wegen fehlender Messzeit überhaupt nicht realisierbar.

- ⊗ Der Neutronenfluss ist auch an den stärksten Quellen um sechs Größenordnungen kleiner als der Photonenfluss moderner Synchrotrons. Neutronenstreuexperimente dauern somit viel länger.
- ⊗ Aufgrund der grossen Eindringtiefe sind aufwändige Abschirmungen notwendig, damit erstens die Experimente nicht durch unerwünschte Neutronen (Untergrund) beeinträchtigt werden und zweitens die Umwelt und insbesondere der Experimentator nicht unnötiger Strahlenbelastung ausgesetzt werden.

4.2. Elastische kohärente Streuung

Die strenge Periodizität des Kristallgitters oder zeitlich konstante Korrelation der Orientierung magnetischer Momente führt zu Interferenzerscheinungen der gestreuten Neutronen, der kohärenten Streuung. Aus der elastischen (kein Energieverlust des Neutrons) kohärenten Neutronenstreuung (auch Braggsche Streuung genannt) kann die strukturelle Anordnung der Atome und die Anordnung und Ausrichtung der magnetischen Momente bestimmt werden. Die folgenden Streuquerschnitte entsprechen alle der Mittelung für Pulverproben und unpolarisierte Neutronen.

4.2.1. Nukleare Streuung

Aus der allgemeinen Streutheorie ist bekannt, dass die Streuung einer Welle mit Wellenzahl k an einem Potential mit effektiver Reichweite R isotrop ist, d.h. die vom Streuzentrum auslaufende Welle ist kugelsymmetrisch, solange $k \cdot R \ll 1$. Diese Bedingung ist für die Streuung thermischer Neutronen ($k \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$) mittels der starken Wechselwirkung mit den Kernen ($R \sim 1 \text{ fm}$) bestens erfüllt ($k \cdot R \sim 10^{-5}$). Für das Wechselwirkungspotential zwischen Kern und Neutron kann deshalb das Fermi-Pseudopotential angesetzt werden: $V_F(\mathbf{r}) \sim b \cdot \delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})$, wobei b die Streulänge des Atoms am Ort \mathbf{R} bezeichnet. Die Überlagerung der von jeder Kernposition ausgehenden Kugelwelle führt dann in erster Ordnung Störungstheorie (Fermi's Goldene Regel) zu folgendem Streuquerschnitt:

$$\left(\frac{d\sigma}{\delta\Omega}\right)_{\text{koh,nuk}} = N \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} |F_n(\mathbf{Q})|^2 \delta(\mathbf{Q} - \boldsymbol{\tau}) \quad (13)$$

- N : Anzahl Elementarzellen im Kristall
 V_0 : Volumen der Elementarzelle
 \mathbf{Q} : Streuvektor ($\hbar\mathbf{Q}$ = Impulsübertragung des Neutrons an die Probe)
 $\boldsymbol{\tau}$: reziproker Gittervektor

Kohärente nukleare Streuung tritt nur bei diskreten Streuvektoren \mathbf{Q} auf, die durch das reziproke Kristallgitter bestimmt sind. Die Intensität ist bestimmt durch den Strukturfaktor:

$$F_n(\mathbf{Q}) = \sum_j b_j e^{-w_j(\mathbf{Q})} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j}, \quad (14)$$

wobei über alle Atompositionen \mathbf{r}_j in der Einheitszelle summiert wird. Die kohärente Streulänge b_j ist im Allgemeinen ein Mittelwert über alle verschiedenen Isotope eines Atoms. Der Debye-Waller Faktor $e^{-w_j(\mathbf{Q})}$ beschreibt die Abnahme der Intensität mit zunehmendem Streuvektor aufgrund der thermischen Bewegung der Atome. Der Strukturfaktor $F_n(\mathbf{Q})$ wird in Kapitel 6 für ein kubisch flächenzentriertes Gitter hergeleitet.

4.2.2. Magnetische Streuung

Die magnetische Streuung der Neutronen erfolgt aufgrund der Dipol-Dipol Wechselwirkung des magnetischen Momentes des Neutrons mit den magnetischen Momenten im Festkörper. Prinzipiell müssen dabei auch die magnetischen Momente der Kerne berücksichtigt werden. Da aber das von einem Kernmoment produzierte Dipolfeld zirka 2000 mal ($\sim \mu_K/\mu_B = m_e/m_p$) schwächer ist als das der Elektronen, ist die magnetische Streuung der Neutronen an den Kernmomenten nicht beobachtbar. Für die

magnetische Streuung der Neutronen sind deshalb nur die magnetischen Momente der Elektronen im Festkörper von Bedeutung.

Das magnetische Moment eines Elektrons ist aus einem Spin- und einem Bahndrehimpuls-Anteil zusammengesetzt. Das Wechselwirkungspotential zwischen dem Neutron am Ort \mathbf{r} mit Spin $\boldsymbol{\sigma}$ und einem Elektron im Ursprung mit Spin \mathbf{s} und Impuls \mathbf{p} ist:

$$V(\mathbf{r}) = 2\gamma\mu_N\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \left\{ \text{rot} \left(\frac{\mathbf{s} \times \mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \right) + \frac{1}{\hbar} \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \right\} \quad (15)$$

γ : gyromagnetisches Verhältnis des Neutrons = -1.913

μ_K, μ_B : Kern-, respektive Bohrmagneton

Die Herleitung des Wirkungsquerschnittes ist nun um einiges komplizierter als für den Fall der nuklearen Streuung und bedarf im Speziellen einer Theorie des Magnetismus der Festkörperelektronen. In unserem Fall sind magnetische Momente ungepaarter Atomelektronen von Interesse, wie sie z.B. in den Uebergangsmetallen (3d-Elektronen) und den Seltenen Erden (4f-Elektronen) vorkommen. Die Herleitung des Streuquerschnitts ist auch in diesem Fall nicht trivial, doch kann ein wichtiges Resultat ohne jegliche Rechnung vorweggenommen werden: In einer einfachen Betrachtung des Streuvorganges (Born-Approximation) ist die Amplitude der gestreuten Welle proportional der Fouriertransformierten des Streupotentials, was in unserem Fall der Dichteverteilung der magnetischen Momente entspricht. Da die magnetischen Momente der Atomelektronen in einem Bereich $R \sim 1 \text{ \AA}$ um die Kernposition lokalisiert sind, nimmt die Streuamplitude schon bei $Q \sim 1/R = 1 \text{ \AA}^{-1}$ ab. Der Wirkungsquerschnitt der magnetischen Streuung wird deshalb, ähnlich dem Wirkungsquerschnitt der Röntgenstreuung, einen Formfaktor enthalten, der im allgemeinen mit zunehmendem Streuvektor Q rasch abfällt.

Die quantenmechanische Behandlung des Problems gibt für die Vektor-Amplitude der magnetischen Streuung eines Neutrons an einem einzelnen Atom:

$$a_M(\mathbf{Q}, \mathbf{m}) = \frac{1}{2} r_e \gamma f(\mathbf{Q}) \left\{ \boldsymbol{\mu} \cdot \frac{\mathbf{Q}(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{Q})}{Q^2} \right\} \quad (16)$$

$f(\mathbf{Q})$: magnetischer Formfaktor (= Fouriertransformierte der Spindichte-Verteilung)

$\boldsymbol{\mu}$: elektronisches magnetisches Moment des Atoms

Der klassische Elektronenradius $r_e = e^2/m_e c^2 = 2.82 \cdot 10^{-13}$ cm ist vergleichbar mit den nuklearen Streulängen, d.h. die magnetische und die nukleare Neutronenstreuung sind von derselben Grössenordnung. Der Vektorcharakter ermöglicht zudem die Bestimmung der Richtung der magnetischen Momente.

In einem paramagnetischen Festkörper gibt es keine Korrelation zwischen den Spinorientierungen der einzelnen Atome, so dass nur inkohärente elastische Streuung auftritt. In einem Festkörper mit magnetischer Ordnung ermöglicht aber die zeitlich konstante Korrelation der Spins verschiedener Atome Interferenz der gestreuten Wellen. Dies liefert einen Beitrag zur kohärenten elastischen Streuung. Wird die Periodizität der magnetischen Struktur durch einen kommensurablen Ordnungswellenvektor $\tilde{\mathbf{k}}$ beschrieben, dann sind die magnetischen Momente in der chemischen Einheitszelle am Gitterpunkt \mathbf{r}_j durch diejenigen in der Einheitszelle am Ursprung bestimmt durch:

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{R}) = \sum_j \boldsymbol{\mu}_j \cdot e^{-2\pi i \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (17)$$

Der Wirkungsquerschnitt für kohärente elastische Streuung ist dann:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{koh,mag}} = N_m \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \left| \mathbf{F}_{m_\perp}(\mathbf{Q}) \right|^2 \delta(\mathbf{Q} - n\tilde{\mathbf{k}} - \boldsymbol{\tau}). \quad (18)$$

Wiederum tritt nur bei diskreten Werten von \mathbf{Q} Streuung auf. Für $|\tilde{\mathbf{k}}| \neq 0$ werden nun aber im Diffraktogramm gegenüber den nuklearen Bragg-Reflexen verschobene Satelliten beobachtet. Der magnetische Strukturfaktor ist:

$$\mathbf{F}_m(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2} r_0 \gamma \sum_j f_j(\mathbf{Q}) \boldsymbol{\mu}_j e^{-W_j(\mathbf{Q})} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (19)$$

4.2.3. Kombinierte elastische nukleare und magnetische Streuung

Für unpolarisierte Neutronen gibt es keine Interferenz der nuklear und magnetisch gestreuten Neutronen, und der totale Wirkungsquerschnitt ist die Summe der beiden einzelnen Beiträge (Gleichung 13+18). Die Polarisationsanalyse zeigt aber, dass bei der nuklearen Streuung das Neutron den gleichen Spinzustand beibehält, während bei der magnetischen Streuung, bei geeigneter Wahl der Streugeometrie, eine Spinumkehr stattfindet. Eine Messung mit polarisierten Neutronen ermöglicht somit eine direkte Unterscheidung von nuklearer und magnetischer Streuung.

5. Aufgabenstellung des Praktikumsversuches

Die magnetische Struktur einer polykristallinen Probe der Verbindung Mangansulfid MnS soll mittels Neutronendiffraktion untersucht werden.

Das von Ihnen durchzuführende Experiment ist eines der Neutronendiffraktionsexperimente die von Shull zwischen 1946-51 durchgeführt wurden und für die er 1994 mit dem Nobelpreis geehrt wurde!

5.1. Informationen über Mangansulfid MnS

- Kochsalz-Struktur (siehe Figur 5)
- Ionenkristall: Mn^{2+} , S^{2-}

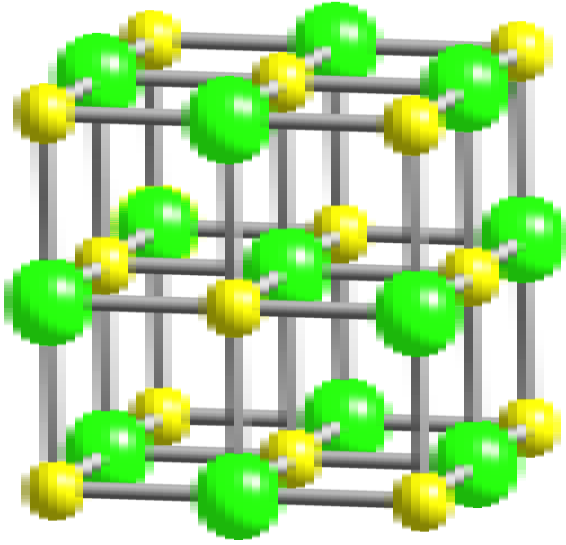


Fig. 5: Elementarzelle der NaCl-Struktur (yellow = Na^+ (0,0,0), green = Cl^- (1/2,1/2,1/2))

- Gitterkonstante $a=5.199 \text{ \AA}$ bei $T=4.2 \text{ K}$
- Raumgruppe $\text{Fm } \bar{3}m$
- Elektronenkonfiguration von $\text{Mn}^{2+}:3d^5$
- Néel Temperatur $T_N=151 \text{ K}$
- antiferromagnetische Fernordnung = ferromagnetische (111) Ebenen mit antiparalleler Orientierung der magnetischen Momente benachbarter Schichten [z.B. $(\bar{1} \bar{1} \bar{1})$]
- somit ist die magnetische Einheitszelle gegenüber der chemischen Einheitszelle in allen 3 Koordinatenrichtungen verdoppelt ($a_{\text{mag}}=2 a_{\text{nuk}}$)

5.2. Aufgaben zur Vorbereitung des Experimentes (* fakultativ)

- ✍️ Mangansulfid kristallisiert in der Kochsalzstruktur (NaCl-Struktur). Welchem Bravais-Gittertyp ist MnS zuzurechnen? Überlegen Sie, welchem Gittertyp die primitive Elementarzelle von MnS angehört (ebenfalls Zeichnung!)

- ✎ Berechnen Sie für MnS die Streuwinkel 2θ und den nuklearen Strukturfaktor der Bragg-Reflexe (111), $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, (200), (220). Die Wellenlänge sei $\lambda_1=1.96 \text{ \AA}$ und $\lambda_2=2.34 \text{ \AA}$.
- ✎ Berechnen Sie für MnS die Intensität und die Lage der im Pulverdiagramm auftretenden nuklearen und magnetischen Peaks für Streuwinkel $2\theta < 70^\circ$! ($\lambda_2=2.34 \text{ \AA}$, Winkel $\nu=90^\circ$ zwischen Spinrichtung und [111]-Achse, $e^{-2W}=1$; keine Absorptionskorrektur)
- ✎* Berechnen Sie den magnetischen, elastischen Wirkungsquerschnitt für einen Paramagneten!
- ✎* Wie beeinflussen Gitterverzerrungen, z.B. als Folge niedriger magnetischer Symmetrie und magnetoelastischer Wechselwirkungen, die Messungen?
- ✎* Man spricht von magnetischer Fernordnung, wenn die Spins in beliebiger räumlicher Entfernung korreliert sind und von Nahordnung, wenn nur Spins im Nahbereich korreliert sind. Wie kann man Nah- und Fernordnung unterscheiden? (Hinweis: Betrachten Sie die Summation über die Spins für eine kleine Zahl korrelierter Spins genauer).
- ✎* Kann man magnetische Fernordnung durch andere Experimente einfacher bei gleicher Aussagekraft nachweisen?
- ✎* Es gibt sogenannte eindimensionale Magnete, bei denen nur Spins entlang einer Kette korreliert sind, nicht aber Spins verschiedener Ketten. An welchen Orten im reziproken Gitter erwartet man in einem solchen Fall magnetische Bragg-Streuung?

6. Spezielle Betrachtungen anhand von Mangansulfid MnS

Wenn Sie Frage 1 aus Kapitel 5.2. gelöst haben, erscheint es Ihnen sicher zweckmässig, zur Beschreibung des Gitters das einfach kubische Gitter mit nichtprimitiver Elementarzelle zu wählen. Dies hat zur Folge, dass in der Darstellung des einfach kubischen Gitters bestimmte reziproke Gitterpunkte einen verschwindenden Strukturfaktor haben. Verdeutlichen Sie sich das anhand folgender Überlegung:

Das kubisch flächenzentrierte Gitter entsteht aus dem einfach kubischen Gitter durch Einführen der zusätzlichen Translationen $\mathbf{r}_1 = a \cdot (0,0,0)$, $\mathbf{r}_2 = a \cdot (1/2,1/2,0)$, $\mathbf{r}_3 = a \cdot (0,1/2,1/2)$ und $\mathbf{r}_4 = a \cdot (1/1,0,1/2)$. Der nukleare Strukturfaktor $\mathbf{F}_n(\mathbf{Q})$ kann über die Flächenzentrierung faktorisiert werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_n(\mathbf{Q}) &= \sum_j b_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} \\ &= \sum_j b_j \left[e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} + e^{i\mathbf{Q} \cdot ((1/2,1/2,0) + \mathbf{r}_j)} + e^{i\mathbf{Q} \cdot ((0,1/2,1/2) + \mathbf{r}_j)} + e^{i\mathbf{Q} \cdot ((1/2,0,1/2) + \mathbf{r}_j)} \right] \\ &= \left[1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} \right] \sum_j b_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} \end{aligned}$$

Die Bedingung, dass der Vorfaktor nicht verschwindet, ist $h+k, h+l, k+l = 2n$

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{Q}) = \begin{cases} 4 \sum_j b_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} & h,k,l \text{ alle gerade oder ungerade ansonsten} \\ 0 & \end{cases}$$

☞ Welchem Bravais-Gittertyp entspricht also das reziproke Gitter? Fertigen Sie eine Zeichnung der entsprechenden Elementarzelle an!

7. Experimentelle Methoden

Als weiterführende Literatur kann empfohlen werden:

- ☞ M.J. Buerger "Kristallographie: Eine Einführung in die geometrische und röntgenographische Kristallkunde", 1. Auflage, de Gruyter Verlag Berlin New York (1977)
- ☞ W. Kleber "Einführung in die Kristallographie" Verlag Technik Berlin (1990)
- ☞ J.L. Amoros, M.J. Buerger, M.C. de Amoros "The Laue Method" Academic Press New York (1975)

☞ C. Giacovazzo, H.L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti “Fundamentals of Crystallography” Oxford University Press (1992)

Wird eine Probe von einem monochromatischen Neutronen- oder Röntgenstrahl getroffen, so reflektieren alle Netzebenen, für die die Braggsche Gleichung erfüllt ist.

$$n \cdot \lambda = 2d_{hkl} \cdot \sin\theta \quad (20)$$

λ : Wellenlänge

d_{hkl} : Abstand d einer Netzebenenschar parallel zur Fläche (hkl)

θ : halber Winkel zwischen Primärstrahlrichtung und Richtung des abgelenkten Strahls (sog. Glanzwinkel)

n : Ordnung der Interferenz

Die von diesen Netzebenen gebeugten Strahlen liefern charakteristische Linien und werden detektiert. Infolge der instrumentellen Auflösung und der Mosaikbreite der Kristalle sind die von der Theorie vorhergesagten δ -Funktionen immer Linien mit einer gewissen endlichen Breite (Fig. 6), die sehr oft durch Gaussfunktionen approximiert werden können.

$$g(x) \sim e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (21)$$

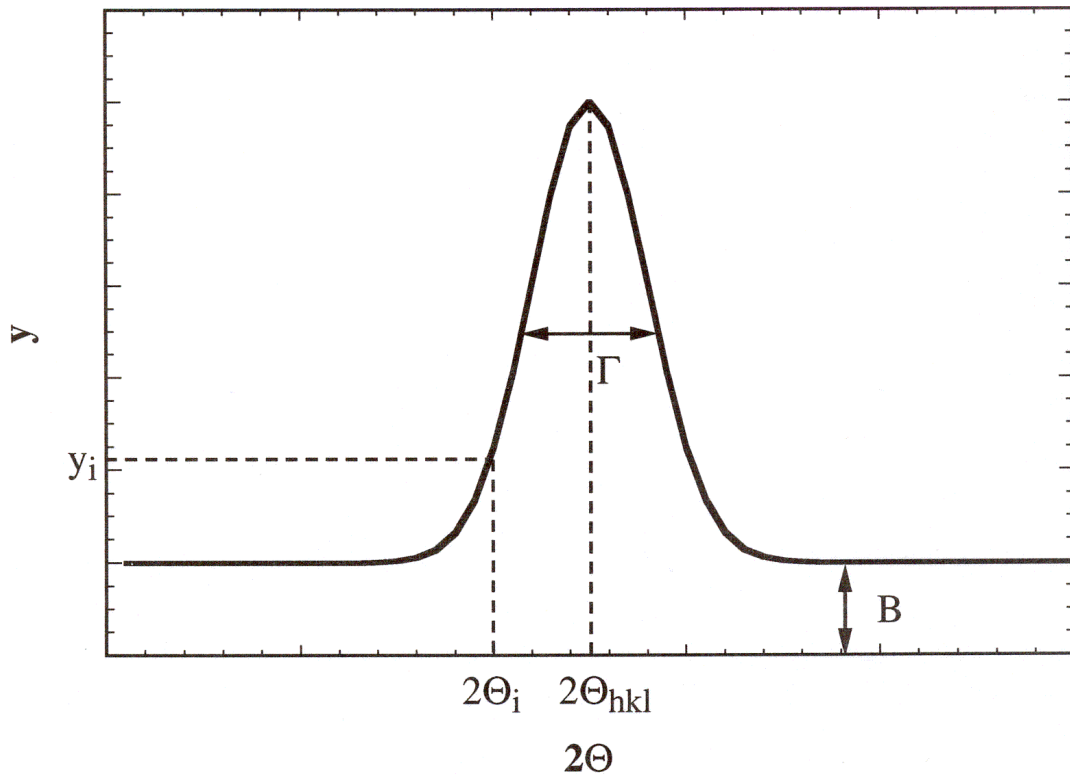


Fig. 6: Bragg-Reflex im Diffraktogramm

Folgende Gleichungen können zur Beschreibung des auftretenden Reflexes angewendet werden:

$$\Gamma = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \quad (22)$$

$$y_i \sim m_{hkl} L(\Theta) |F_{hkl}(\mathbf{Q})|^2 e^{-4 \ln 2 \left(\frac{2\Theta_i - 2\Theta_{hkl}}{\Gamma} \right)^2} + B \quad (23)$$

Γ : Halbwertsbreite

m_{hkl} : Multiplizität

$L(\Theta)$: Lorentzfaktor (siehe Kapitel 8.2.)

Betrachten wir die Braggsche Gleichung [Gleichung (20)], so müssen wir feststellen, dass nur dann Reflexion an einer gegebenen Netzebenenschar (hkl) auftritt,

wenn bei festgelegter Wellenlänge λ auch ein bestimmter Glanzwinkel θ vorliegt. Die Braggsche Bedingung zeigt uns, wann Interferenzen zu erwarten sind:

- a) Bei festem θ muss λ variabel sein (Laue-Methode).
- b) Bei fester Wellenlänge λ (monochromatisierte Strahlung) muss θ variabel sein. Die Variation kann entweder durch Drehen des Kristalls (Drehkristallverfahren) oder dadurch, dass eine grosse Zahl kleiner Kristalle in beliebiger Orientierung (Kristallpulver) durchstrahlt werden (Pulver- oder Debye-Scherrer-Verfahren), realisiert werden.

7.1. Pulvermethoden

Da die Beugungsdiagramme substanzspezifisch sind und die gesamte Information über die Gittermetrik enthalten, ist eine extrem genaue Bestimmung der Gitterkonstanten mit Hilfe der Pulvermethoden möglich. Pulvermethoden geben einen schnelleren Überblick über die nuklearen und magnetischen Strukturen. Da Pulveraufnahmen keine gute Symmetrieinformation liefern und es schwierig, teilweise sogar unmöglich ist, die Bravais-Zelle zu bestimmen, eignen sich die Pulvermethoden nur wenig zur Aufklärung nuklearer Strukturen. Ein weiterer Nachteil der Pulvermethoden ist das Auftreten von Linienkoinzidenzen ungleichwertiger sowie symmetrieäquivalenter Reflexe. In den letzten drei Jahrzehnten gewann die Strukturverfeinerung durch Analyse von Pulverdaten (RIETVELD-Verfeinerung) immer mehr an Bedeutung. Ist die Struktur einer Verbindung weitgehend bekannt, so eignen sich Pulvermethoden hervorragend zur Untersuchung von nuklearen und magnetischen Phasenübergängen als Funktion von Temperatur und Druck. Es gibt verschiedene Pulvermethoden, wovon hier nur die Debye-Scherrer-Methode und das Guinier-Verfahren genannt werden sollen. Auf eine Erläuterung dieser oder anderer Methoden sowie auf eine Darstellung theoretischer Grundlagen wird an dieser Stelle verzichtet, da hierzu ausreichend Literatur vorhanden ist (siehe Literaturhinweise in Kap. 7).

7.2. Einkristallmethoden

Einkristallmethoden eignen sich nicht nur am besten zur Bestimmung von Symmetrie und Elementarzelle, sondern ermöglichen vor allem die Strukturbestimmung unbekannter Substanzen, da die Möglichkeit der Linienüberlappung nicht besteht, weil jeweils nur für eine Netzebene die Reflexionsbedingung (Braggsche Gleichung) simultan erfüllt werden kann. Mit Einkristallverfahren können (nukleare und magnetische) Überstrukturen identifiziert und grosse Einkristalle orientiert werden. Die Einkristallverfahren liefern weitreichendere Aussagen als Pulveraufnahmen über Symmetrie, Gittermetrik und Auslöschungsgesetze. Man unterscheidet das Präzessions-Verfahren nach Buerger, das Laue-Verfahren, die Drehkristallmethode und das Weissenberg-Verfahren.

8. Durchführung des Experimentes

8.1. Das Pulverdiffraktometer HRPT

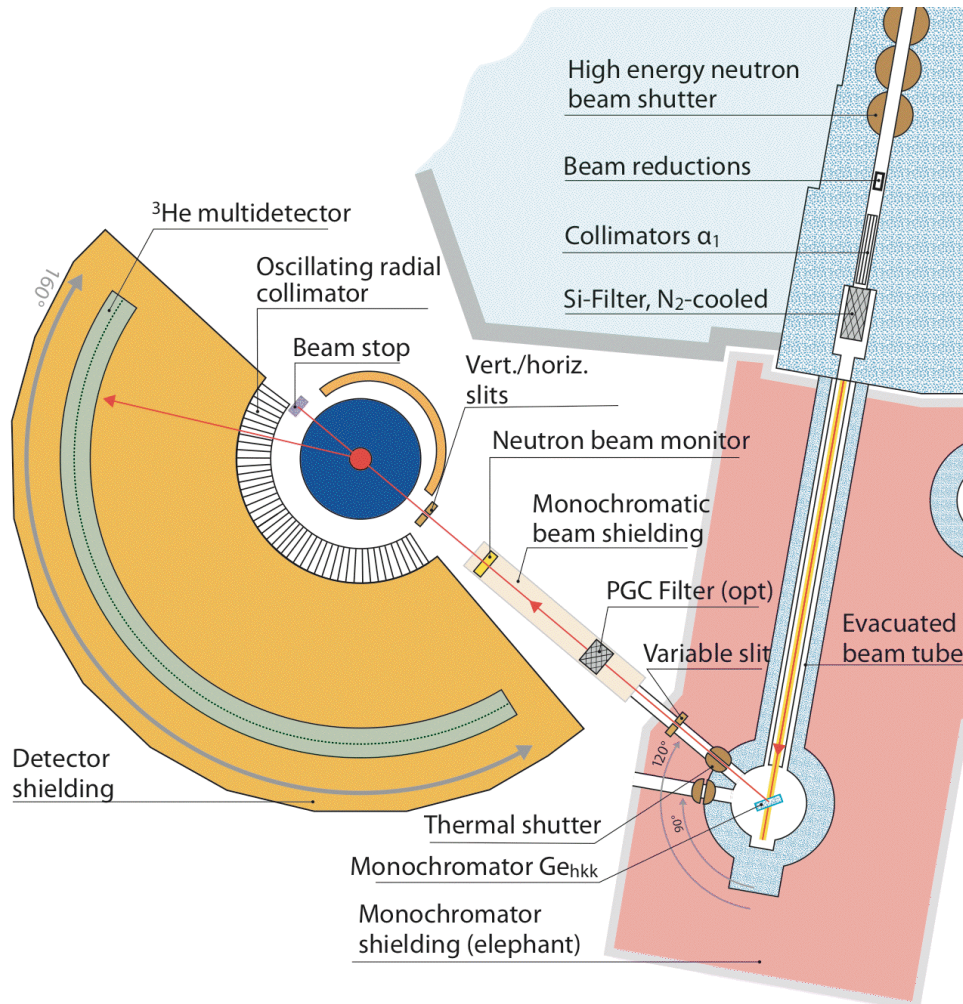


Fig. 7: Schematische Zeichnung des Pulverdiffraktometers HRPT

The multidetector diffractometer HRPT [1] is designed as flexible instrument for efficient neutron powder diffraction studies - also for small sample sizes. [High resolution](#) ($\delta d/d < 0.001$) is achieved by thermal neutrons, large scattering angles of the

monochromator and of the sample (up to 165°). Instruktionen zum Bedienen des Neutronen-diffraktometers HRPT finden Sie beim Instrument.

Um auf den neusten Informationsstand über den Betrieb der Spallationsneutronenquelle SINQ und die einzelnen Instrumente insbesondere das Pulverdiffraktometer DMC zu gelangen, können folgende Seiten im Internet empfohlen werden:

<http://sinq.web.psi.ch/sinq/instr/hrpt/index.html>

8.2. Durchführung des Experimentes – Was ist zu tun?

1. Einstellen der Wellenlänge
2. Positionierung des Detektors
3. Montieren der Probe

Die in einem Vanadium-Zylinder unter He-Atmosphäre eingeschlossene MnS Probe wird in einer Kühlmaschine montiert und auf dem Spektrometertisch auf die Strahlmitte justiert. Die Kühlvorrichtung besteht aus einem geschlossenen He-Kreislauf. Die Temperatur kann im Bereich von ca. 8 K bis Zimmertemperatur variiert werden.

Bei Zylindergeometrie der Pulverprobe gilt folgende Formel für die Intensität I der gestreuten Neutronen:

$$I(\mathbf{Q}) = C \cdot A(\Theta) \cdot L(\Theta) \cdot \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{koh,nuk}} \quad (24)$$

$A(\Theta)$: Absorptionskorrektur

$L(\Theta)$: Lorentzfaktor

C : Skalenfaktor (berücksichtigt Detektorempfindlichkeit und Neutronenfluss)

Die Absorptionskorrektur kann durch folgende Formel gut approximiert werden:

$$A(\Theta) = e^{-\left[(a_1 + b_1 \sin^2 \Theta) \mu r - (a_2 + b_2 \sin^2 \Theta) (\mu r)^2 \right]} \quad (25)$$

μ : linearer Absorptionskoeffizient

r : Radius der Probe

Die Grösse μr wird mit einer Transmissionsmessung bestimmt gemäss

$$I = I_0 \cdot e^{-2\mu r} \quad (26)$$

I_0 : Intensität des direkten Strahls ohne Probe

I : Intensität des direkten Strahls mit Probe

Der Lorentzfaktor $L(\Theta)$ ist wie folgt definiert:

$$L(\Theta) = \frac{1}{\sin \theta \sin 2\theta} \quad (27)$$

8.3. Aufgaben während des Experimentes

1. Verifizieren Sie den Strukturtyp und die Gitterkonstanten bei Raumtemperatur
2. Weisen Sie die antiferromagnetische Fernordnung bei tiefer Temperatur ($T < 15$ K) nach!
3. An Hand geeigneter magnetischer Reflexe kann die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Ordnung gemessen werden. Daraus kann durch Normierung via nukleare Intensitäten der Temperaturverlauf des geordneten magnetischen Moments $\mu(T)$ der Manganionen bestimmt werden.

Anhang A: Magnetischer Formfaktor von Mn^{2+} (nach Watson und Freeman)

$\sin\theta / \lambda [\text{\AA}^{-1}]$	$f \sim \langle j_0 \rangle$
0.00	1.0000
0.05	0.9720
0.10	0.8943
0.15	0.7826
0.20	0.6558
0.25	0.5299
0.30	0.4153
0.35	0.3169
0.40	0.2358
0.45	0.1709
0.50	0.1202
0.60	0.0522

Anhang D: Instrumentenlageplan der Neutronenquelle SINQ

