

Komplexe Atomstreuamplituden für die elastische Elektronenstreuung an Festkörperatomen

VON H. RAITH*

I. Physikalisches Institut der Technischen Universität Berlin, 1 Berlin-Charlottenburg, Deutschland

(Eingegangen am 2. Februar 1967)

Complex scattering amplitudes of atoms in solids of many elements for 40 and 100 keV electrons are presented. The changed potential of atoms in solids is approximated by a special correction function. The influence of the different potential functions (Thomas-Fermi or Hartree), interatomic distances, and electron energies on the complex atomic scattering amplitudes is discussed. The atomic scattering amplitudes of single atoms for small scattering angles depend strongly on the potential functions used, because they differ for outer atomic regions, especially for light elements. This is not the case, however, for atoms in solids, because by using the corrected potential the original potential differences in the outer atomic regions are suppressed.

1. Einführung

Die Atomstreuamplitude $f(\theta)$ beschreibt die Streuwelle eines Einzelatoms nach Betrag und Phase. Sie ist definiert durch die für die Streuung einer ebenen Welle an einem Atom anzusetzende Randbedingung (1) (Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung). Danach setzt sich die Erregung in grosser Entfernung hinter dem Atom additiv aus der ursprünglich einfallenden ebenen Welle und einer vom Atom ausgehenden Kugelwelle (Streuwelle) zusammen:

$$\psi(\mathbf{R}) = \psi_E \exp[i(\mathbf{k}, \mathbf{R})] + \psi_E f(\theta) \exp(ikR)/R \quad (1)$$

einfallende ebene Streuwelle in Fraun-
Welle hoferscher Näherung

ψ_E = Amplitude der einfallenden ebenen Welle

$\psi(\mathbf{R})$ = Erregung im Aufpunkt

\mathbf{R} = Vektor vom streuenden Atom zum Aufpunkt
(R gross gegen Atomdurchmesser)

$f(\theta) = |f(\theta)| \exp[i\eta(\theta)]$ = komplexe Atomstreuamplitude

θ = Streuwinkel (gemessen gegen Primärrichtung)

Bei sehr schwachstreuenden Atomen ist die Atomstreuamplitude für Elektronen im wesentlichen eine reelle Grösse (die Wirkung des Atompotentials entspricht einem *schwachen* Phasenobjekt). Mit zunehmender Streuwirkung ergeben sich jedoch nicht mehr zu vernachlässigende Streuphasen η , deren Kenntnis in vielen Fällen von Interesse ist. Obgleich die Streuphase auf die Streuintensität eines Einzelatoms keinen Einfluss hat, so beeinflusst sie jedoch die kinematischen Reflexintensitäten von solchen Kristallen, die aus verschiedenen schweren Atomen bestehen und bewirkt nach Glauber & Schomaker (1953) bei Molekülen aus unterschiedlich schweren Atomen sogar eine Änderung in der Lage der Interferenzringe. Komplexe Atomstreuamplituden haben in letzter Zeit auch Interesse

gewonnen für die Berechnung dynamischer Beugungserscheinungen an Einkristallen (Boersch, Jeschke & Raith, 1964). So gelingt unter Verwendung komplexer Atomstreuamplituden im Vielstrahlfall prinzipiell eine exakte Berechnung der Beugung, während im Zwei-strahlfall noch eine näherungsweise Beschreibung der anomalen Absorption möglich ist.

Der Imaginärteil der Atomstreuamplitude in Primär-richtung hat darüber hinaus noch für die Berechnung der elastischen Streuabsorption eine besondere Bedeutung, da er über das optische Theorem mit dem totalen elastischen Streuquerschnitt verknüpft ist (Mott & Massey, 1965). Komplexe Atomstreuamplituden wurden bisher u. a. von Ibers & Hoerni (1954) und von Zeitler & Bahr (1964) bzw. von Zeitler & Olsen (1964, 1967) für die Einzelatome zahlreicher Elemente berechnet.

Je nach der verwendeten Potentialfunktion (Thomas-Fermi oder Hartree) ergeben sich für die Atomstreuamplituden beträchtliche Unterschiede im Bereich kleiner Streuwinkel ($< 10^{-2}$ rad). Diese Unterschiede sind im wesentlichen auf den unterschiedlichen Potentialverlauf in den äusseren Atombezirken zurückzuführen (Lenz, 1954). Die Tatsache, dass die Potentialverhältnisse der äusseren Atombereiche noch so stark die Kleinwinkelstreuung beeinflussen, liess andererseits vermuten, dass das Streuverhalten der Atome im Kleinwinkelbereich auch durch den Einbau der Atome in einen Festkörper (Kristall) sich stark ändert (Lippert, 1964). Diese Vermutung lag auch insofern nahe, da Streumessungen an Folien meist wesentlich geringere elastische Streuquerschnitte ergaben (Brünger & Menz, 1965; Cosslett & Thomas, 1964; Hilgner & Kessler, 1965) als sie für Einzelatome berechnet und z. T. auch gemessen (Fink & Kessler, 1966) wurden. Im Folgenden wird gezeigt, wie man den veränderten Potentialverhältnissen der Festkörperatome in Näherung Rechnung tragen kann und welchen Einfluss eine entsprechende Korrektur auf die Atomstreuamplituden hat.

* Gegenwärtige Anschrift: Kontron G. m. b. H.,
8 München-Feldmoching, Lerchenstr. 8, Deutschland.

Potentialfunktionen von Einzel- und Festkörperatomen

Die Beschreibung der Atompotentiale ist über die Thomas-Fermi-Funktion oder über die genauer berechneten Hartree-Funktionen, die von Byatt (1956) analytisch gefasst wurden, möglich. Die Potentialfunktionen haben dabei die Form:

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} (a_1 e^{-b_1 x} + a_2 e^{-b_2 x} + a_3 e^{-b_3 x}) \quad (2)$$

Coulomb-Potential Abschirmfaktor
mit

$$x = 1,13 Z^{1/3} r / a_H \quad a_H = 0,529 \text{ \AA} \text{ (Bohrscher Radius)}$$

$$e/4\pi\epsilon_0 = 14,37 \text{ [V\AA]}.$$

Während der Abschirmfaktor des Thomas-Fermi-Potentials noch für alle Atome gleiche Koeffizienten besitzt, sind nach Byatt (1956) zur Beschreibung der Hartree-Funktionen für die verschiedenen Atome jeweils andere Abschirmkoeffizienten erforderlich.

In der Tabelle 1 sind die Koeffizienten der Abschirmfaktoren für diejenigen Potentialfunktionen wiedergegeben, die den in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen zugrundeliegen.

In Fig. 1 sind die Potentialfunktionen für Kohlenstoff und Gold nach Thomas-Fermi und Hartree-Byatt dargestellt. Eingetragen sind ferner die Atomradien im Kristall bei Annahme einer dichten Kugelpackung (kub. flz.). Daraus ist einmal zu erkennen, dass die Thomas-Fermi-Funktion für Kohlenstoff nur in den äusseren Atombereichen wesentlich von der entsprechenden Hartree-Byatt-Funktion abweicht. Ferner ist zu erkennen, dass das Atompotential am Atomrand, also in der Mitte zwischen zwei Atomen, noch einen beträchtlichen Wert zwischen 5 bis 10 Volt besitzt.

Das Potential eines Einzelatoms ausserhalb des Atomradius hat für ein Festkörperatom keine Bedeutung mehr. Im Festkörper entsteht stattdessen ein minimales Potential. Für Elektronen bewirkt dieses minimale Potential lediglich eine zusätzliche, für alle Elektronen gleiche, Phasenschiebung, die die Streuverhältnisse nicht beeinflusst, sondern nur bei der Bestimmung des inneren Potentials berücksichtigt werden muss. Für die Streuwirkung eines Festkörperatoms ist demnach ein wesentlich anderer Potentialverlauf massgebend als für ein Einzelatom. Sofern man die Kugelsymmetrie des Atompotentials beibehalten will lässt sich das wirksame Potential eines Festkörperatoms (korrigiertes Potential) aus dem Potential des

Einzelatoms (unkorr. Pot.) in Näherung durch die folgende Korrekturfunktion beschreiben (vgl. auch die entsprechende Darstellung in Fig. 2):

$$V_{\text{kor}}(r) = V(r) + V(2r_0 - r) - 2V(r_0) \text{ für } r \leq r_0$$

$$V_{\text{kor}}(r) = 0 \text{ für } r \geq r_0 \quad (3)$$

Durch Verwendung des korrigierten Potentials für Festkörperatome wird ferner erreicht, dass sich die Potentiale benachbarter Atome in einem Kristall formal nicht mehr überlappen, wodurch eigentlich überhaupt erst eine Berechnung der Kristallbeugung über die Atomstreuamplituden möglich wird (Boersch, Jeschke & Raith 1964).

3. Berechnung komplexer Atomstreuamplituden

Zur Berechnung komplexer Atomstreuamplituden ist die erste Bornsche Näherung nicht mehr geeignet, da sie in ihrem Gültigkeitsbereich auf sehr schwach-

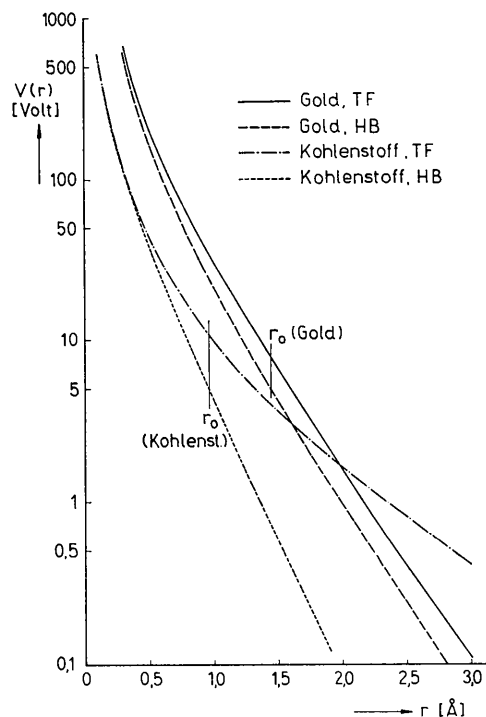


Fig. 1. Potentialverlauf für Kohlenstoff- und Goldatome nach Thomas-Fermi (TF) und Hartree-Byatt (HB). Die angegebenen Atomradien beziehen sich auf Kristallatome in dichter Kugelpackung.

Tabelle 1. Koeffizienten von Potentialfunktionen

	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3
Thomas-Fermi-Potential (Ibers & Hoerni, 1954)	0,255	0,581	0,164	0,246	0,947	4,356
Hartree-Byatt-Potential (Byatt, 1956) C ($Z=6$)	1,25	-0,44	0,19	0,828	1,41	4,29
Hg ($Z=80$)	0,19	0,56	0,25	0,257	0,779	3,16

Tabelle 2. Komplexe Atomstreuamplituden für Festkörperatome in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ ($^\circ$) für 40 und 100 keV-Elektronen

Für die einzelnen Elemente sind chemische Kurzzeichen (El), Ordnungszahl (Z), verwendeter Atomradius (r_0) sowie Betrag (\AA) und Phase (rad) der winkelabhängigen Atomstreuamplitude angegeben. Die jeweils erste Zahlenreihe gilt für 40, die zweite für 100 keV-Elektronen. Zur Berechnung wurde das korrigierte Thomas-Fermi-Potential verwendet.

El	Z	r_0 [Å]	θ [Grad]																							
			0°		1°		2°		4°		6°		8°		10°		12°		16°		20°		24°		26°	
			f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η
Li	3	1.57	1.397	0.030	1.088	0.035	0.565	0.056	0.177	0.110	0.086	0.148	0.051	0.176	0.034	0.197	0.024	0.215	0.015	0.242	0.010	0.261	0.007	0.275	0.006	0.286
Li	3	1.57	1.480	0.019	0.786	0.030	0.260	0.062	0.079	0.101	0.037	0.127	0.015	0.159	0.011	0.170	0.006	0.184	0.005	0.192	0.003	0.196	0.003	0.197	0.003	0.197
Be	4	1.13	1.141	0.043	0.995	0.047	0.674	0.062	0.224	0.129	0.113	0.172	0.067	0.212	0.045	0.240	0.032	0.263	0.019	0.300	0.013	0.326	0.010	0.345	0.007	0.360
Be	4	1.13	1.210	0.028	0.646	0.036	0.351	0.065	0.103	0.120	0.049	0.154	0.029	0.179	0.019	0.197	0.014	0.212	0.009	0.231	0.006	0.248	0.004	0.250	0.004	0.250
C	6	1.16	1.607	0.061	1.397	0.067	0.941	0.089	0.322	0.181	0.165	0.245	0.098	0.301	0.066	0.344	0.047	0.378	0.028	0.433	0.019	0.472	0.014	0.501	0.011	0.523
C	6	1.16	1.705	0.039	1.166	0.051	0.496	0.094	0.150	0.171	0.072	0.221	0.043	0.258	0.029	0.285	0.021	0.306	0.013	0.336	0.009	0.353	0.007	0.363	0.005	0.366
Na	11	1.92	4.390	0.081	3.160	0.105	1.514	0.183	0.553	0.328	0.283	0.444	0.172	0.537	0.116	0.611	0.084	0.673	0.051	0.771	0.034	0.842	0.025	0.895	0.020	0.936
Na	11	1.92	4.669	0.053	2.135	0.093	0.815	0.181	0.262	0.307	0.128	0.394	0.077	0.458	0.052	0.507	0.037	0.546	0.023	0.600	0.016	0.633	0.012	0.652	0.010	0.659
Mg	12	1.60	3.829	0.095	3.017	0.114	1.655	0.180	0.598	0.338	0.305	0.464	0.186	0.565	0.125	0.646	0.091	0.714	0.055	0.820	0.037	0.898	0.022	0.956	0.021	1.002
Mg	12	1.60	4.077	0.063	2.258	0.098	0.963	0.189	0.294	0.321	0.139	0.417	0.083	0.486	0.056	0.540	0.041	0.582	0.025	0.642	0.017	0.678	0.013	0.700	0.011	0.708
Al	13	1.43	3.571	0.107	2.940	0.121	1.758	0.182	0.633	0.354	0.326	0.488	0.199	0.594	0.135	0.671	0.098	0.754	0.059	0.870	0.040	0.954	0.033	1.016	0.023	1.068
Al	13	1.43	4.077	0.071	2.322	0.102	0.918	0.196	0.304	0.338	0.150	0.439	0.093	0.516	0.060	0.574	0.044	0.619	0.027	0.684	0.019	0.724	0.014	0.748	0.012	0.758
Si	14	1.45	5.139	0.161	4.224	0.187	2.534	0.277	0.955	0.530	0.504	0.734	0.312	0.903	0.213	1.044	0.156	1.164	0.095	1.357	0.065	1.501	0.040	1.613	0.037	1.701
Si	14	1.45	5.121	0.108	3.494	0.157	1.389	0.298	0.482	0.513	0.241	0.676	0.146	0.803	0.099	0.900	0.072	0.958	0.048	1.043	0.030	1.162	0.022	1.207	0.018	1.229
Cr	24	1.28	4.741	0.182	4.053	0.205	2.649	0.283	1.007	0.555	0.541	0.765	0.336	0.940	0.229	1.103	0.167	1.234	0.102	1.441	0.070	1.600	0.052	1.723	0.040	1.821
Cr	24	1.28	5.121	0.123	3.450	0.165	1.499	0.305	0.517	0.541	0.260	0.718	0.158	0.852	0.107	0.958	0.078	1.043	0.053	1.291	0.037	1.353	0.028	1.442	0.022	1.474
Fe	26	1.27	4.945	0.194	4.237	0.218	2.785	0.300	1.066	0.587	0.574	0.810	0.357	1.004	0.244	1.172	0.179	1.313	0.109	1.538	0.075	1.710	0.055	1.844	0.043	1.951
Fe	26	1.27	5.019	0.139	3.631	0.176	1.639	0.332	0.570	0.591	0.288	0.788	0.175	0.938	0.119	1.056	0.086	1.151	0.053	1.291	0.037	1.353	0.028	1.442	0.022	1.474
Co	27	1.26	5.444	0.200	4.310	0.225	2.848	0.307	1.094	0.602	0.591	0.831	0.367	1.032	0.251	1.206	0.184	1.351	0.113	1.585	0.077	1.763	0.057	1.903	0.044	2.015
Co	27	1.26	5.479	0.141	3.776	0.186	1.686	0.338	0.588	0.606	0.297	0.810	0.180	0.965	0.122	1.077	0.089	1.186	0.055	1.371	0.038	1.427	0.028	1.469	0.023	1.523
Ni	28	1.24	5.043	0.207	4.350	0.231	2.904	0.314	1.120	0.616	0.607	0.850	0.378	1.050	0.258	1.235	0.189	1.387	0.116	1.630	0.079	1.814	0.059	1.960	0.046	2.077
Ni	28	1.24	5.803	0.142	3.919	0.192	1.722	0.353	0.604	0.626	0.306	0.835	0.186	0.995	0.126	1.122	0.092	1.225	0.056	1.375	0.039	1.475	0.029	1.540	0.023	1.576
Cu	29	1.20	5.337	0.209	4.563	0.235	2.987	0.325	1.149	0.636	0.621	0.879	0.388	1.090	0.266	1.275	0.195	1.431	0.119	1.680	0.082	1.872	0.060	2.024	0.047	2.145
Cu	29	1.20	6.379	0.141	4.110	0.198	1.752	0.371	0.622	0.646	0.315	0.862	0.192	1.029	0.130	1.161	0.095	1.266	0.055	1.422	0.040	1.526	0.030	1.594	0.024	1.632
Zn	30	1.37	5.865	0.207	4.914	0.237	3.076	0.340	1.180	0.658	0.635	0.913	0.397	1.130	0.273	1.316	0.209	1.477	0.122	1.737	0.084	1.935	0.062	2.092	0.048	2.218
Zn	30	1.37	6.042	0.179	4.042	0.252	2.136	0.474	0.778	0.814	0.398	1.092	0.244	1.308	0.166	1.481	0.122	1.622	0.075	1.804	0.052	1.921	0.039	2.002	0.030	2.144
Zr	40	1.60	10.147	0.194	7.029	0.262	3.422	0.462	1.375	0.817	0.744	1.112	0.467	1.383	0.322	1.611	0.237	1.809	0.146	2.133	0.100	2.377	0.074	2.590	0.052	2.758
Zr	40	1.60	11.061	0.135	4.908	0.262	2.007	0.470	0.749	0.803	0.382	1.067	0.234	1.274	0.159	1.438	0.117	1.572	0.072	1.772	0.049	1.910	0.037	2.003	0.029	2.060
Hf	72	1.47	7.559	0.244	6.185	0.286	3.694	0.427	1.438	0.816	0.778	1.138	0.489	1.417	0.338	1.658	0.249	1.868	0.153	2.216	0.106	2.491	0.078	2.713	0.061	2.896
Hf	72	1.47	8.321	0.172	5.107	0.252	2.166	0.476	0.792	0.822	0.406	1.104	0.248	1.326	0.170	1.503	0.124	1.648	0.076	1.866	0.053	2.017	0.039	2.121	0.031	2.187
Mo	42	1.40	7.290	0.254	6.062	0.293	3.739	0.426	1.453	0.824	0.789	1.149	0.496	1.431	0.343	1.677	0.252	1.893	0.156	2.249	0.107	2.529	0.080	2.756	0.062	2.946
Mo	42	1.40	8.042	0.179	5.120	0.255	2.203	0.478	0.804	0.833	0.413	1.118	0.253	1.346	0.173	1.528	0.127	1.676	0.085	1.900	0.054	2.055	0.040	2.164	0.032	2.232
Ru	44	1.37	7.493	0.271	6.271	0.310	3.920	0.446	1.526	0.869	0.831	1.212	0.524	1.512	0.362	1.777	0.267	2.010	0.165	2.397	0.114	2.705	0.084	2.957	0.066	3.116
Ru	44	1.37	8.306	0.193	5.375	0.271	2.339	0.506	0.857	0.887	0.442	1.194	0.272	1.420	0.191	1.639	0.136	1.802	0.084	2.049	0.052	2.223	0.044	2.346	0.034	2.426
Rh	45	1.44	7.972	0.267	6.566	0.311	3.973	0.459	1.549	0.885	0.841	1.236	0.530	1.543	0.366	1.811	0.270	2.042	0.167	2.441	0.115	2.756	0.086	3.015	0.067	3.283
Rh	45	1.44	8.835	0.191	5.516	0.276	2.366	0.520	0.871	0.904	0.449	1.210	0.276	1.470	0.189	1.672	0.139	1.838	0.085	2.091	0.059	2.270	0.044	2.397	0.035	2.481
Sa	56	2.25	12.334	0.242	8.513	0.328	4.209	0.574	1.698	1.026	0.925	1.413	0.583	1.759	0.403	2.064	0.297	2.333	0.183	2.791	0.126	3.166	0.094	3.421	0.074	3.752
Sa	56	2.25	13.642	0.176	6.139	0.339	2.658	0.609	0.978	1.050	0.507	1.411	0.313	1.704	0.215	1.942	1.579	2.140	0.096	2.446	0.068	2.671	0.050	2.835	0.039	2.950
Pt	78	1.38	9.014	0.354	8.170	0.407	5.050	0.591	1.976	1.166	1.008	1.633	0.693	2.044	0.482	2.410	0.356	2.736	0.216	3.299	0.145	3.783	0.105	4.217	0.082	

streuende Atome beschränkt ist und von vornherein nur reelle Atomstreuamplituden liefert. Andererseits ist die exakte Berechnung über die Partialwellenmethode (Mott & Massey, 1965) zu aufwendig, so dass es sich als zweckmässig erwiesen hat (Zeitler & Olsen, 1964, 1967), bei der Berechnung der Atomstreuamplituden für Elektronenstreuung von der sog. WKB-Methode in der Molière-Näherung (Molière, 1947) auszugehen. In dieser Näherung werden geradlinige Elektronenbahnen innerhalb des Atompotentials angenommen. So wird zunächst die integrale Phasenschiebung im Atompotential und damit die 'Objektfunktion' $O(r)$ unmittelbar hinter dem Atom ermittelt (die Koordinate 'r' dient ab jetzt nur noch zur zweidimensionalen Atombeschreibung):

$$O(r) = \exp [i\varphi(r)]. \quad (4)$$

Die weitere Behandlung kann dann wellenoptisch z. B. über das Kirchhoffsche Integral erfolgen (für schnelle Elektronen (> 20 keV) ist die wellenoptische Behandlung der quantenmechanischen praktisch äquivalent). Für eine nur radial veränderliche Objektfunktion lautet

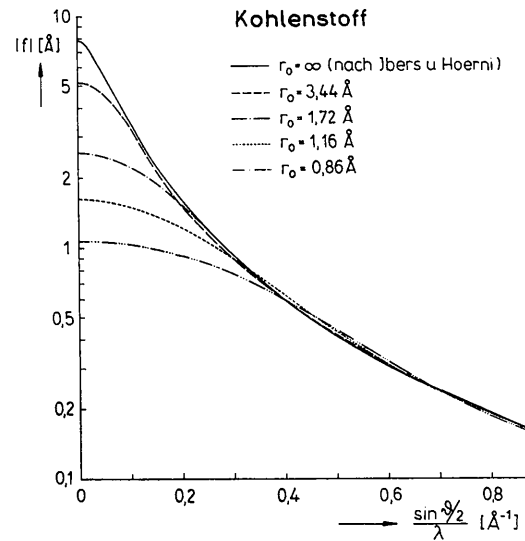


Fig.3. Verlauf der Atomstreuamplitude von Kohlenstoff im Kleinwinkelbereich bei Zugrundelegung verschiedener Atomradien r_0 (korr. Thomas-Fermi-Potential, 40 keV).

Tabelle 3. Komplexe Atomstreuamplituden für Festkörperatome in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ für 40 und 100 keV-Elektronen

Für die einzelnen Elemente sind chemische Kurzzeichen (El), Ordnungszahl (Z), verwendeter Atomradius (r_0) sowie Betrag (\AA) und Phase (rad) der winkelabhängigen Atomstreuamplitude angegeben. Die jeweils erste Zahlenreihe gilt für 40, die zweite für 100 keV-Elektronen. Zur Berechnung wurde das korrigierte Thomas-Fermi-Potential verwendet.

El	z	r_0 [R]	$(\sin \theta/2)/\lambda$ [\AA^{-1}]																											
			0.00		0.05		0.10		0.15		0.20		0.25		0.30		0.35		0.40		0.50		0.60		0.70					
			f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η	f	η				
Li	3	1.57	1.397	0.030	1.356	0.030	1.240	0.032	1.070	0.036	0.880	0.041	0.694	0.049	0.535	0.059	0.413	0.070	0.325	0.081	0.224	0.099	0.167	0.113	0.126	0.127				
Be	4	1.13	1.480	0.019	1.436	0.020	1.313	0.021	1.135	0.023	0.932	0.027	0.735	0.032	0.567	0.038	0.437	0.046	0.344	0.053	0.237	0.065	0.177	0.073	0.134	0.083				
B	5	1.13	1.141	0.043	1.122	0.043	1.069	0.045	0.986	0.047	0.882	0.051	0.767	0.056	0.650	0.063	0.540	0.072	0.443	0.083	0.297	0.108	0.211	0.132	0.162	0.150				
C	6	1.16	1.201	0.028	1.190	0.028	1.133	0.029	1.045	0.031	0.935	0.033	0.813	0.037	0.689	0.041	0.572	0.047	0.469	0.054	0.314	0.070	0.223	0.086	0.176	0.098				
N	7	1.16	1.607	0.061	1.581	0.061	1.504	0.063	1.385	0.067	1.236	0.073	1.075	0.081	0.908	0.091	0.754	0.104	0.619	0.119	0.400	0.154	0.303	0.187	0.236	0.211				
O	8	1.16	1.705	0.039	1.677	0.039	1.595	0.041	1.469	0.044	1.312	0.048	1.138	0.053	0.964	0.059	0.801	0.068	0.658	0.077	0.446	0.101	0.322	0.122	0.251	0.137				
Na	11	1.92	4.390	0.081	4.216	0.084	3.742	0.092	3.097	0.107	2.432	0.129	1.863	0.157	1.440	0.190	1.153	0.220	0.959	0.245	0.700	0.290	0.523	0.338	0.410	0.378				
Mg	12	1.60	4.669	0.053	4.484	0.055	3.981	0.060	3.297	0.070	2.591	0.084	1.986	0.103	1.536	0.124	1.230	0.144	1.023	0.160	0.747	0.189	0.558	0.221	0.434	0.248				
Al	13	1.43	3.829	0.095	3.720	0.098	3.414	0.104	2.973	0.116	2.473	0.133	1.991	0.157	1.579	0.186	1.259	0.210	1.027	0.251	0.742	0.303	0.566	0.347	0.438	0.395				
Si	14	1.43	4.077	0.063	3.961	0.064	3.637	0.068	3.168	0.076	2.632	0.087	2.125	0.103	1.686	0.122	1.345	0.143	1.097	0.164	0.793	0.198	0.606	0.227	0.468	0.258				
P	15	1.43	3.571	0.107	3.465	0.109	3.254	0.115	2.904	0.125	2.490	0.140	2.071	0.161	1.661	0.189	1.361	0.220	1.109	0.254	0.786	0.316	0.602	0.363	0.472	0.409				
S	16	1.45	3.807	0.071	3.719	0.072	3.477	0.076	3.099	0.082	2.661	0.093	2.213	0.106	1.801	0.123	1.456	0.144	1.187	0.166	0.841	0.207	0.644	0.238	0.505	0.268				
Cl	17	1.45	5.139	0.161	5.018	0.164	4.677	0.173	4.172	0.189	3.676	0.213	2.976	0.245	2.430	0.286	1.976	0.333	1.625	0.383	1.174	0.473	0.910	0.543	0.720	0.614				
Ar	18	1.45	5.431	0.108	5.402	0.110	5.039	0.116	4.500	0.126	3.867	0.142	3.223	0.163	2.636	0.190	2.147	0.221	1.768	0.254	1.279	0.313	0.993	0.359	0.786	0.406				
K	19	1.28	4.745	0.182	4.653	0.185	4.399	0.193	4.013	0.207	3.543	0.227	3.040	0.255	2.536	0.291	2.120	0.347	1.758	0.384	1.253	0.486	0.959	0.570	0.767	0.640				
Ca	20	1.28	5.121	0.123	5.102	0.124	4.756	0.130	4.345	0.139	3.842	0.153	3.304	0.171	2.782	0.195	2.314	0.224	1.922	0.256	1.372	0.323	1.051	0.378	0.842	0.424				
Sc	21	1.27	4.941	0.194	4.854	0.197	4.593	0.205	4.195	0.220	3.710	0.241	3.191	0.270	2.686	0.308	2.234	0.354	1.855	0.406	1.325	0.514	1.015	0.603	0.812	0.678				
Ti	22	1.27	5.355	0.131	5.298	0.133	4.980	0.139	4.556	0.148	4.036	0.163	3.479	0.182	2.937	0.207	2.449	0.237	2.038	0.272	1.458	0.343	1.118	0.402	0.897	0.451				
V	23	1.26	5.019	0.200	4.928	0.203	4.666	0.211	4.266	0.226	3.781	0.246	3.258	0.278	2.748	0.316	2.289	0.362	1.904	0.415	1.500	0.526	1.016	0.619	0.834	0.696				
Cr	24	1.26	5.444	0.136	5.346	0.137	5.068	0.143	4.642	0.153	4.120	0.168	3.559	0.187	3.010	0.213	2.514	0.243	2.095	0.279	1.500	0.352	1.150	0.413	0.923	0.463				
Mn	25	1.28	5.043	0.203	4.945	0.210	4.699	0.218	4.309	0.233	3.829	0.255	3.312	0.284	2.804	0.323	2.344	0.369	1.953	0.423	1.396	0.537	1.066	0.634	0.854	0.713				
Fe	26	1.28	5.479	0.141	5.384	0.142	5.111	0.148	4.694	0.158	4.189	0.173	3.625	0.193	3.076	0.218	2.579	0.249	2.154	0.284	1.543	0.359	1.181	0.423	0.948	0.475				
Co	27	1.28	5.337	0.209	5.235	0.212	4.952	0.221	4.518	0.237	4.059	0.261	3.425	0.293	2.890	0.334	2.393	0.384	1.989	0.441	1.424	0.557	1.090	0.653	0.877	0.734				
Ni	28	1.28	5.803	0.142	5.697	0.144	5.392	0.150	4.928	0.161	4.421	0.177	3.755	0.198	3.167	0.226	2.640	0.259	2.198	0.297	1.586	0.374	1.215	0.437	0.979	0.490				
Cu	29	1.37	5.865	0.207	5.741	0.210	5.388	0.221	4.859	0.239	4.367	0.266	3.751	0.303	3.158	0.350	2.431	0.406	2.010	0.467	1.451	0.583	1.125	0.675	0.899	0.760				
Zn	30	1.37	6.379	0.141	6.247	0.144	5.870	0.151	5.304	0.163	4.627	0.181	3.921	0.206	3.259	0.237	2.687	0.274	2.227	0.315	1.612	0.392	1.254	0.452	1.005	0.508				
Sr	38	2.16	10.147	0.194	9.686	0.225	8.466	0.225	6.878	0.268	5.343	0.292	4.126	0.402	3.277	0.477	2.704	0.545	2.291	0.605	1.698	0.724	1.305	0.839	1.043	0.945				
Zr	40	1.60	8.102	0.231	7.877	0.236	7.246	0.252	6.366	0.280	5.308	0.322	4.318	0.379	3.475	0.440	2.821	0.525	2.343	0.600	1.740	0.724	1.386	0.834	1.073	0.951				
Hf	72	1.60	8.894	0.162	8.652	0.165	7.977	0.176	7.000	0.196	5.933	0.224	4.821	0.263	3.901	0.310	3.182	0.362	2.653	0.412	1.982	0.496	1.552	0.569	1.233	0.647				
In	41	1.47	7.559	0.244	7.377	0.249	6.864	0.263	6.107	0.288	5.225	0.326	4.339	0.376	3.543	0.441	2.892	0.515	2.395	0.592	1.756	0.728	1.371	0.830	1.092	0.950				
Sn	42	1.40	8.321	0.172	8.126	0.175	7.576	0.185	6.763	0.202	5.813	0.226	4.853	0.262	3.986	0.306	3.270	0.356	2.713	0.408	2.004	0.499	1.574	0.573	1.259	0.648				
Mo	42	1.40	7.292	0.254	7.129	0.258	6.673	0.272	5.992	0.295	5.135	0.330	4.356	0.378	3.593	0.439	2.949	0.511	2.442	0.585	1.778	0.732	1.386	0.846	1.106	0.955				
Ru	44	1.40	8.042	0.179	7.870	0.183	7.380	0.192	6.640	0.208	5.790	0.232	4.831	0.265	4.046	0.306	3.340	0.355	2.776	0.407	2.034	0.503	1.595	0.580	1.262	0.653				
Rh	45	1.37	7.493	0.271	7.333	0.275	6.880	0.289	6.200	0.313	5.390	0.349	4.551	0.398	3.770	0.460	3.103	0.534	2.573	0.615	1.874	0.770	1.484	0.892	1.166	1.007				
Pd	46	1.37	8.306	0.193	8.135	0.196	7.647	0.206	6.916	0.222	6.041	0.247	5.131	0.271	4.277	0.324	3.542	0.374	2.950	0.429	2.158	0.534	1.690	0.617	1.363	0.694				
Ag	47	1.44	7.972	0.267	7.787	0.272	7.263	0.287	6.486	0.314	5.575	0.353	4.651	0.404	3.814	0.474	3.121	0.553	2.586	0.637	1.892	0.788	1.471	0.909	1.179	1.029				
Au	79	1.44	8.835	0.191	8.636	0.194	8.074	0.205	7.237	0.223	6.253	0.251	5.250	0.287	4.															

das Kirchhoffsche Integral in Fraunhoferscher Näherung:

$$\psi(R, \theta) = \frac{2\pi\psi_E}{iR\lambda} \int_0^\infty \mathbf{O}(r) J_0(2\pi r \sin \theta/\lambda) r dr. \quad (5)$$

ψ_E = Erregung der einfallenden ebenen Welle im Objekt

$\psi(R, \theta)$ = Erregung im Abstand R vom Atom unter dem Streuwinkel θ

θ = Beugungswinkel, gemessen gegen die Primär- richtung

J_0 = nullte Besselfunktion

λ = Elektronenwellenlänge.

Zur Berechnung der Atomstreuamplituden ist, wie erwähnt, zunächst die dreidimensionale Potentialverteilung in eine zweidimensionale Objektfunktion zu überführen. Die Aufsummierung der Phasenschiebung im Atompotential erfolgt zweckmässigerweise maschinell, wobei die Phasenschiebung $d\varphi$ in einem Raumelement des Potentials V und der Länge dz (alle numerischen Integrationen wurden in Schrittweiten von 0,02 Å durchgeführt) für eine Elektronenenergie eU gegeben ist durch:

$$d\varphi = \frac{\pi V}{\lambda U} dz \quad U \gg V. \quad (6)$$

Die so erhaltene Objektfunktion (4) kann noch nicht unmittelbar in das Kirchhoffsche Integral (5) eingesetzt werden, da die Objektfunktion seitlich unbegrenzt ist. Zur Berechnung der Atomstreuamplituden ist jedoch entsprechend der Gleichung (1) von der Objektfunktion noch die 'Objektfunktion' der einfallenden

Welle [$\mathbf{O}(x)=1$] abzuziehen, die nicht in Fraunhoferscher Näherung behandelt wird. Die verbleibende komplexe Funktion $\mathbf{Q}(r)$ ist dann auf den Bereich des Atoms beschränkt und kann unmittelbar in das Kirchhoffsche Integral eingesetzt werden.

$$\mathbf{Q}(r) = \exp[i\varphi(r)] - 1 = \cos \varphi(r) - 1 + i \sin \varphi(r). \quad (7)$$

Für die Erregung in grosser Entfernung hinter dem Atom ergibt sich analog zu Gleichung (1):

$$\psi(R, \theta) = \psi_E \exp[i(\mathbf{k}, \mathbf{R})] + \frac{\psi_E 2\pi \exp(ikR)}{i\lambda} \times \int_0^\infty \mathbf{Q}(r) J_0(2\pi r \sin \theta/\lambda) r dr. \quad (8)$$

Die komplexe Atomstreuamplitude $\mathbf{f}(\theta)$ berechnet sich daraus zu:

$$\mathbf{f}(\theta) = \frac{2\pi}{i\lambda} \int_0^\infty \mathbf{Q}(r) J_0(2\pi r \sin \theta/\lambda) r dr. \quad (9)$$

4. Numerische Berechnungen

In die Berechnung komplexer Atomstreuamplituden für Festkörperatome geht die Grösse des Atomradius r_0 entscheidend ein. Da der Atomradius auf sehr verschiedene Weise festgelegt werden kann und ausserdem stark von der Bindungsart abhängt, wurde die Berechnung nur für solche Atome vorgenommen, die in Kristallen eine 'metallische Bindung' aufweisen und in kubisch oder hexagonal dichtester Kugelpackung kristallisieren. Die Atomradien sind in diesem Fall genau definiert. Eine Ausnahme wurde lediglich bei Kohlenstoff gemacht, der nicht in dichter Kugelpackung kristallisiert. Der Atomradius wurde dabei trotzdem unter Annahme dichtester Kugelpackung berechnet, um damit vor allem sinnvolle Werte für die häufig verwendeten amorphen Kohleschichten zu erhalten*.

In der Tabelle 2 sind die komplexen Atomstreuamplituden für zahlreiche Festkörperatome wiedergegeben. Die jeweils erste Zahlenreihe wurde für 40, die zweite für 100 keV berechnet. Die Werte für 40 keV lassen sich unmittelbar mit den von Ibers & Hoerni (1954) für Einzelatome (unkorr. Thomas-Fermi-Potential) berechneten komplexen Atomstreuamplituden vergleichen. Zur Berechnung der in den Tabellen 2 und 3 wiedergegebenen Atomstreuamplituden wurde das korrigierte Thomas-Fermi-Potential verwendet, da die Hartree-Potentiale nur für wenige Atome in analytischer Form vorliegen und ausserdem nur auf diese Weise ein Anschluss an die bereits vorliegenden Atomstreuamplituden für Einzelatome erzielt werden konnte. Die Tabelle 3 gibt die komplexen Atom-

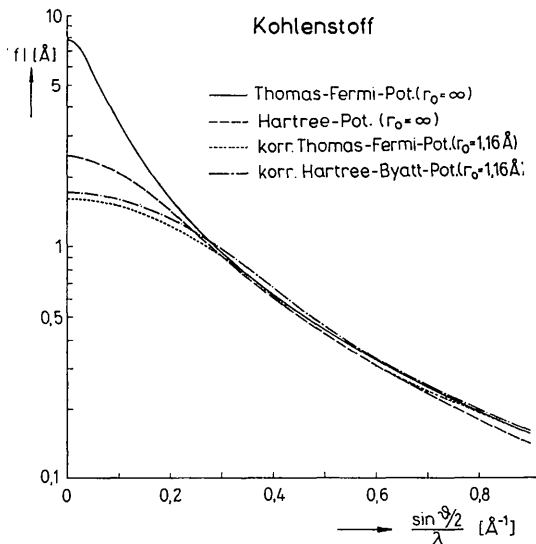


Fig. 4. Winkelabhängigkeit der Atomstreuamplitude für Kohlenstoff, berechnet über die Thomas-Fermi- und Hartree-Byatt-Funktion für Einzelatome (Ibers & Hoerni, 1954; Ibers, 1958) ($r_0 = \infty$) und über die korr. Funktionen für Kristallatome ($r = 1.16$ Å, 40 keV).

* Die Atomradien in kubisch dichter Kugelpackung (kub. fiz.) berechnen sich über Dichte und Atomgewicht zu: $r_0 = 0,6645 \sqrt[3]{A/\rho}$ (Å); A = Atomgewicht, ρ = Dichte (g.cm^{-3}). Die Atomradien der anderen Atome wurden aus dem *Taschenbuch für Chemiker und Physiker* (D'Ans & Lax, 1949) entnommen.

streuamplituden im Kleinwinkelbereich in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ an. In dieser Darstellung ist die geringste Spannungsabhängigkeit zu erwarten. Wiederum gibt die jeweils erste Zahlenreihe die Werte für 40 die zweite die Werte für 100 keV an.

In Fig. 3 sind die Beträge der Atomstreuamplituden für Kohlenstoff unter Verwendung des Thomas-Fermi-Potentials bei Vorgabe verschiedener Atomradien in Abhängigkeit vom Streuwinkel dargestellt. Es wird dabei deutlich, wie stark die äusseren Atombereiche, die allein durch die Vorgabe von r_0 geändert werden, die Kleinwinkelstreuung beeinflussen. Zum anderen zeigt diese Gegenüberstellung auch die Notwendigkeit, eine entsprechende Korrektur des Potentials für Festkörperatome vorzunehmen.

In Fig. 4 sind für Kohlenstoff die Beträge der Atomstreuamplituden für Einzel- und Festkörperatome bei Verwendung der Thomas-Fermi- und Hartree-Byatt-Funktion dargestellt. Es ist bemerkenswert, dass für Kohlenstoff-Festkörperatome sich praktisch die gleiche Streuverteilung über die korr. Thomas-Fermi-Funktion und über die korr. Hartree-Byatt-Funktion berechnet. Da sich die Ungenauigkeit der Thomas-Fermi-Funktion für leichte Atome auf die äusseren Atombereiche beschränkt, wird diese Ungenauigkeit durch die Korrekturvorschrift (3) unterdrückt.

In Fig. 5 und 6 sind die komplexen Atomstreuamplituden in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ für Kohlenstoff und Gold für verschiedene Elektronenenergien dargestellt. Der Berechnung wurde dabei im Gegensatz zu den Tabellenwerten das korr. Hartree-Byatt-Potential zugrundegelegt. Für Kohlenstoff sind die Abweichungen der dargestellten Werte von den über das korrigierte Thomas-Fermi-Potential berechneten Tabellenwerten nur gering ($< 10\%$), während sich für Gold insbesondere im Kleinwinkelbereich noch Abweichungen bis zu 20% ergeben. Der prinzipielle Verlauf ist jedoch in beiden Fällen gleich.

5. Streuabsorption amorpher Schichten

Der totale elastische Streuquerschnitt σ eines Atoms ist ein Mass für die elastische Gesamtstreuung und wird definiert durch:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (10)$$

Andererseits ist der totale elastische Streuquerschnitt über das optische Theorem (Mott & Massey, 1965) mit dem Imaginärteil der Atomstreuamplitude in Primärriichtung in folgender Weise verknüpft:

$$\sigma = 2\lambda \text{Im}f(0). \quad (11)$$

Sofern die Atomstreuamplituden im Kleinstwinkelbereich zuverlässig sind, ist die Berechnung des Streuquerschnittes über das optische Theorem der anderen Methode vorzuziehen, da man dabei die Integration über die relativ ungenaue Rutherford-Verteilung für grosse Streuwinkel umgeht (die Rutherford-Werte

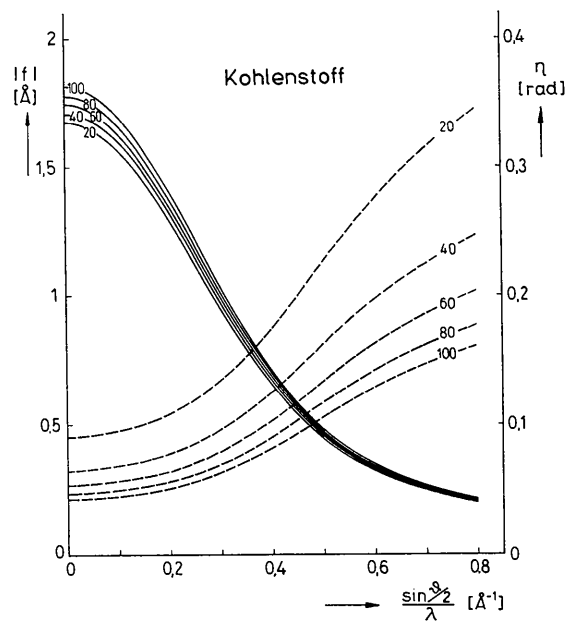


Fig. 5. Komplexe Atomstreuamplitude von Kohlenstoff in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ für verschiedene Elektronenenergien [keV], berechnet aus dem korr. Hartree-Byatt-Potential ($r_0 = 1.16 \text{ \AA}$). — Betrag der Atomstreuamplitude; ---- Streuphase.

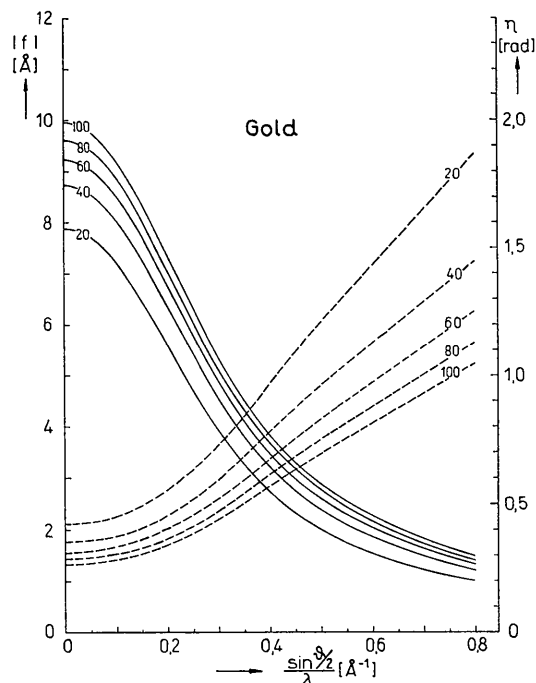


Fig. 6. Komplexe Atomstreuamplituden von Gold in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ für verschiedene Elektronenenergien [keV], berechnet über das korr. Hartree-Byatt-Potential ($r_0 = 1.44 \text{ \AA}$). — Betrag der Atomstreuamplitude; ---- Streuphase.

gelten nur dann, wenn die Elektronenwellenlänge klein gegen den Stossparameter ist).

Bei amorphen Schichten kann man für die Streuabsorption das normale Absorptionsgesetz anwenden, so dass gilt:

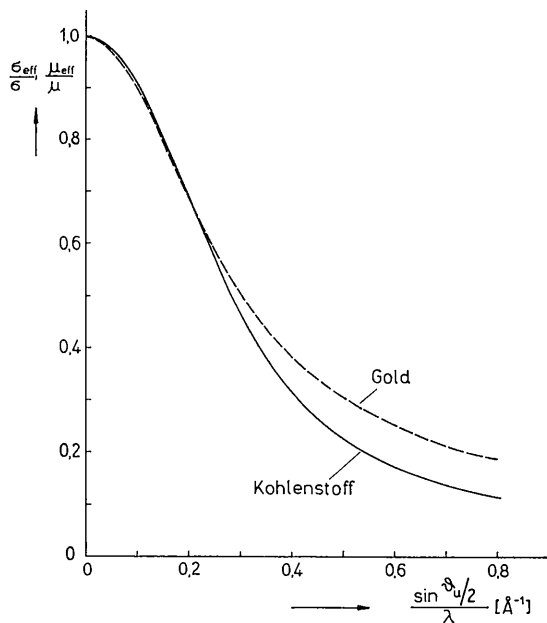


Fig.7. Verhältnis von effektivem Streuquerschnitt oder Absorptionskoeffizienten (σ_{eff}, μ_{eff}), der durch Streuung ausserhalb einer vorgegebenen Apertur θ_u entsteht, zum jeweiligen Maximalwert (σ, μ) in Abhängigkeit von der Grösse der Apertur (Thomas-Fermi-Potential 40 keV).

$$I/I_0 = \exp(-N\sigma/F) = \exp[-(L\sigma/A)M] = \exp[-(L\rho\sigma/A)D]. \quad (12)$$

I/I_0 = Verhältnis der ungestreuten zur einfallenden Intensität

σ = totaler elastischer Streuquerschnitt

N = Zahl der streuenden Atome pro Flächenelement F

L = Loschmidtsche Zahl

A = Atomgewicht

ρ = Dichte

D = Schichtdicke

M = Massenbelegung (Masse pro cm^2).

Je nachdem, ob nach der Streuabsorption bei vorgegebener Schichtdicke oder vorgegebener Massenbelegung gefragt ist, ist der 'Dickenabsorptionskoeffizient' μ_D oder der Massenabsorptionskoeffizient μ_M zu verwenden.

Diese Absorptionskoeffizienten berechnen sich aus dem Streuquerschnitt der Einzelatome zu:

$$\mu_D [\text{\AA}^{-1}] = \frac{L\rho\sigma}{A} = \frac{0.6025 \cdot \rho [\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}] [\text{\AA} \cdot \rho^2]}{A [\text{g}\cdot\text{Mol}^{-1}]} \quad (13)$$

$$\mu_M \left[\frac{\text{cm}^2}{\mu\text{g}} \right] = \frac{L\sigma}{A} = \frac{60.25 \cdot \sigma [\text{\AA}^2]}{A [\text{g}\cdot\text{Mol}^{-1}]} \quad (14)$$

Eine Streuabsorption entsprechend diesen Koeffizienten ist jedoch nur bei amorphen Schichten zu erwarten. Bei Kristallen ist die Wechselwirkung zwischen Primärstrahl und Bragg-Reflexen so stark, dass eine Berechnung über die dynamische Theorie erfolgen muss. Es liegt in diesem Fall im allgemeinen eine geringere Absorption vor.

Tabelle 4. Zusammenstellung von Atomgewicht, Dichte, Streuquerschnitt, Dickenabsorptionskoeffizient μ_D und Massenabsorptionskoeffizient μ_M für alle berechneten Elemente

	Z	A	ρ	σ (\AA)		μ_D (\AA^{-1})		μ_M [$\text{cm}^2(\mu\text{g})^{-1}$]	
				40 keV	100 keV	40 keV	100 keV	40 keV	100 keV
Li	3	6,939	0,534	0,0050	0,0021	0,00023	0,00010	0,043	0,018
Be	4	9,012	1,857	0,0059	0,0025	0,00073	0,00031	0,039	0,017
C	6	12,01	2,25	0,0117	0,0050	0,00132	0,00056	0,059	0,025
Na	11	22,99	0,971	0,0430	0,0184	0,00109	0,00047	0,113	0,048
Mg	12	24,31	1,74	0,044	0,019	0,00189	0,00081	0,109	0,047
Al	13	26,98	2,699	0,046	0,020	0,00277	0,00120	0,103	0,044
Ti	22	47,90	4,50	0,099	0,044	0,00562	0,00249	0,125	0,055
Cr	24	52,00	6,92	0,104	0,046	0,00830	0,00372	0,120	0,054
Fe	26	55,85	7,86	0,115	0,052	0,00973	0,00439	0,124	0,056
Co	27	58,93	8,89	0,120	0,054	0,01092	0,00495	0,123	0,056
Ni	28	58,71	8,90	0,125	0,057	0,0114	0,00518	0,128	0,058
Cu	29	63,54	8,929	0,133	0,061	0,0113	0,00515	0,126	0,058
Zn	30	65,37	7,20	0,145	0,066	0,00963	0,00441	0,134	0,061
Sr	38	87,62	2,60	0,236	0,111	0,00422	0,00178	0,162	0,076
Zr	40	91,22	6,52	0,223	0,106	0,00963	0,00456	0,148	0,070
Nb	41	92,91	8,58	0,220	0,105	0,0123	0,00583	0,143	0,068
Mo	42	95,94	10,21	0,221	0,106	0,0141	0,00684	0,139	0,067
Pd	46	106,4	11,97	0,241	0,118	0,01635	0,00802	0,137	0,067
Ag	47	107,9	10,50	0,254	0,124	0,0149	0,00725	0,142	0,069
Ba	56	137,3	3,61	0,355	0,177	0,00563	0,00280	0,156	0,077
Pt	78	195,1	21,45	0,410	0,217	0,0271	0,0144	0,126	0,067
Au	79	197,0	19,30	0,423	0,224	0,0250	0,0132	0,129	0,068
Pb	82	207,2	11,34	0,470	0,248	0,0155	0,00819	0,137	0,072
U	92	238,0	18,95	0,498	0,269	0,0239	0,0129	0,126	0,068

Die Tabelle 4 enthält eine Zusammenstellung der totalen elastischen Streuquerschnitte und Absorptionskoeffizienten für die einzelnen berechneten Elemente für 40 und 100 keV.

Die in der Literatur oft verwendete sog. Aufhellungsdicke ist gleich μ_D^{-1} [\AA], bzw. μ_M^{-1} [$\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$], sie gibt diejenige Schichtdicke an, in der jedes Elektron einmal elastisch gestreut wird, so dass die ungestreut durch die Schicht gelangte Intensität gleich I_0/e ist.

In der Elektronenmikroskopie interessiert oft statt des totalen elastischen Streuquerschnittes mehr der effektive Streuquerschnitt, der die Streuung ausserhalb eines vorgegebenen Aperturwinkels θ_u beschreibt (Boersch, 1947). Diese Streuabsorption lässt sich berechnen, indem man von dem totalen elastischen Streuquerschnitt die integrale Kleinwinkelstreuung bis zu dem jeweiligen Winkel θ_u abzieht:

$$\sigma_{\text{eff}} = 2\pi \int_{\theta_u}^{\pi} |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

$$= \sigma - 2\pi \int_0^{\theta_u} |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (15)$$

In Fig. 7 ist das Verhältnis von effektivem Streuquerschnitt oder effektivem Absorptionskoeffizient zum jeweiligen Maximalwert (für $\theta_u=0$) in Abhängigkeit von $(\sin \theta/2)/\lambda$ für Kohlenstoff und Gold bei 40 keV dargestellt. Bei der gewählten Darstellungsweise liegt eine Abhängigkeit von der Elektronenenergie kaum vor. Für die Absorptionskoeffizienten gilt diese Darstellung jedoch nur im Fall dünner amorpher Schichten bei Vernachlässigung der Mehrfachstreuung (Hilgner & Kessler, 1965; Lenz, 1954). Mit Hilfe der Fig. 7 lassen sich die in der Tabelle 4 angegebenen totalen elastischen Streuquerschnitte auf die gewünschten effektiven Streuquerschnitte umrechnen. So ist z. B. zur Erzielung einer elektronenoptischen Auflösung von 5 \AA eine Apertur von $(\sin \theta/2)/\lambda=0,1$ erforderlich. In diesem Fall liegen nach Fig. 7 die effektiven Streuabsorptionskoeffizienten um ca. 10% unter dem jeweiligen Maximalwert.

Bei kleinsten Aperturen entsteht noch eine zusätzliche Streuabsorption durch die in dieser Arbeit unberücksichtigte unelastische Streuung. Da die unelastische Streuung hauptsächlich in kleinste Winkel (Halbwertsbreite ca. 10^{-4} rad) erfolgt (Boersch, 1947; Lenz, 1954) ist ihre Bedeutung für die Elektronenmikroskopie relativ gering. Bei genaueren Untersuchungen muss jedoch auch der Einfluss der unelastischen Streuabsorption berücksichtigt werden (Lippert, 1958).

In Fig. 8 ist die Abhängigkeit der Absorptionskoeffizienten (elastische Streuabsorption) von der Elektronenenergie für Kohlenstoff dargestellt. Die Berechnung erfolgte über das korrigierte Thomas-Fermi-Potential und das korrigierte Hartree-Byatt-Potential. Bei doppelt logarithmischer Auftragung lässt sich der Verlauf durch Geraden annähern. Dabei ist jedoch zu bemerken, dass eine Extrapolation in stark relativistische Bereiche nicht mehr zulässig ist, da die Berechnung, abgesehen von der

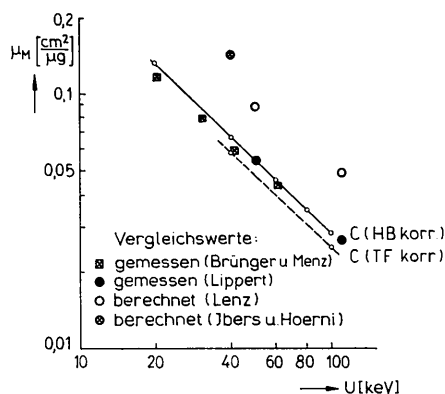


Fig. 8. Abhängigkeit des Massenabsorptionskoeffizienten von der Elektronenenergie für Kohlenstoff, berechnet über das korr. Thomas-Fermi-Potential und das korr. Hartree-Byatt-Potential. Die zusätzlich eingetragenen Vergleichswerte entsprechen Messungen von Lippert (1956) und von Brünger & Menz (1965) sowie Berechnungen von Lenz (1954), Ibers & Hoerni (1954) und Hoerni (1962) (vgl. Text).

Verwendung relativistisch korrigierter Wellenlängen, nichtrelativistisch durchgeführt wurde. In Fig. 8 sind ferner noch folgende Absorptionskoeffizienten als Vergleichswerte eingetragen: der Absorptionskoeffizient, der sich über das optische Theorem aus den komplexen Atomstreuamplituden nach Ibers & Hoerni (1954) ergibt, von Lenz (1954) berechnete Werte sowie Messwerte von Lippert (1956)* und von Brünger & Menz (1965). Es zeigt sich, dass die von Brünger & Menz sowie von Lippert gemessenen Werte gut mit den über die korrigierten Atompotentiale berechneten Werten übereinstimmen.

Herrn Prof. Dr. H. Boersch danke ich für sein Interesse an dieser Arbeit und für viele wertvolle Hinweise. Für anregende Diskussionen danke ich den Herren Dr. H. Schoenebeck, Dr. H. Niedrig und Dipl.-Phys. G. Jeschke. Die umfangreichen numerischen Berechnungen wurden freundlicherweise am Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung (Sektor Mathematik) und am Recheninstitut der Technischen Universität durchgeführt. Die Arbeit wurde durch die Bereitstellung von ERP-Mitteln gefördert.

Literatur

- BOERSCH, H. (1947). *Z. Naturforschung*, **2a**, 615.
 BOERSCH, H., JESCHKE, G. & RAITH, H. (1964). *Z. Physik*, **181**, 436.
 BRÜNGER, W. & MENZ, W. (1965). *Z. Physik*, **184**, 271.
 BYATT, W. J. (1956). *Phys. Rev.* **104**, 1298.
 COSSLETT, V. E. & THOMAS, R. N. (1964). *Brit. J. Appl. Phys.* **15**, 235.
 D'ANS, J. & LAX, E. (1949). *Taschenbuch für Chemiker und Physiker*, p. 190. Berlin, Göttingen, Heidelberg: Springer.

* Der Arbeit von Lippert wurden die Absorptionskoeffizienten für eine Apertur von $(\sin \theta/2)/\lambda=0,37$ entnommen und über Fig. 7 auf die totalen Absorptionskoeffizienten umgerechnet, um den Einfluss der unelastischen Streuung auszuschalten.

- FINK, M. & KESSLER, J. (1966). *Z. Physik*, **196**, 504.
 GLAUBER, R. & SCHOMAKER, V. (1953). *Phys. Rev.* **89**, 667.
 HILGNER, W. & KESSLER, J. (1965). *Z. Physik*, **187**, 119.
 HOERNI, J. A. (1962). In *International Tables for X-Ray Crystallography*. Vol. III. p.222. Birmingham: Kynoch Press.
 IBERS, J. A. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 178.
 IBERS, J. A. & HOERNI, J. A. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 405.
 LENZ, F. (1954). *Z. Naturforschung*, **9a**, 185.
 LIPPERT, W. (1956). *Optik*, **13**, 506.
 LIPPERT, W. (1958). *Z. Naturforschung*, **13a**, 273, 1089.
 LIPPERT, W. (1964). Third Europ. Conf. Electron Micr., Prag. Proc. p. 19.
 MOLIÈRE, G. (1947). *Z. Naturforschung*, **2a**, 133.
 MOTT, N. F. & MASSEY, H. S. (1965). *The Theory of Atomic Collisions*, London: Oxford Univ. Press.
 ZEITLER, E. & BAHR, G. F. (1964). Third Europ. Conf. Electron Micr., Prag, Proc. p.17.
 ZEITLER, E. & OLSEN, H. (1964). *Phys. Rev.* **136**, A, 1546.
 ZEITLER, E. & OLSEN, H. (1967). In Vorbereitung.

Acta Cryst. (1968). **A24**, 93

The Effect of Preferred Orientation on the Intensity Distribution of (hk) Interferences*

BY W. RULAND AND H. TOMPA

Union Carbide European Research Associates, S.A., Brussels 18, Belgium

(Received 20 March 1967)

The X-ray scattering produced by a distribution of two-dimensional lattices with preferred orientation, a problem which arises *e.g.* in the study of anisotropic structures of non-graphitic carbons, is given a rigorous theoretical treatment for infinite and perfect lattices and approximations are given for finite and imperfect lattices as well as for structures with partial positional correlations. As an example of the application, the observed intensity distributions of (hk) interferences of a highly oriented carbon fiber are compared with calculated intensity distributions.

1. Introduction

The intensity diffracted by a two-dimensional lattice is represented in reciprocal space by a periodic array of parallel rod-like intensity distributions. A random distribution of such lattices produces the asymmetric interference lines first discussed by von Laue (1932) for infinitely large and perfect lattices, for which one obtains for given s_h

$$I(s) = \frac{1}{2\pi s \sqrt{(s^2 - s_h^2)}} \quad \text{for } s > s_h$$

$$= 0 \quad \text{for } s < s_h$$

or

$$I(s) = \text{Re} \frac{1}{2\pi s \sqrt{(s^2 - s_h^2)}}, \quad (1)$$

where $I(s)$ is the intensity as a function of the absolute value s of the reciprocal space vector \mathbf{s} ($s = 2 \sin \theta / \lambda$) and s_h is the distance of the rod of index $h (= hk)$ from the origin of reciprocal space; Re means the real part. The intensity along the rod is considered to be unity. Warren (1941), Wilson (1949), Brindley & Méring (1951), Warren & Bodenstein (1966) and Ruland (1967a) have treated the problem of random distributions of two-dimensional lattices of finite size.

The present paper deals with non-random distributions of two-dimensional lattices, a problem which

arises *e.g.* in non-graphitic carbon structures with preferred orientation. The problem has been treated by Guentert & Cvikevich (1964) for a special case of the orientation function ($|\cos^n \varphi|$) and a unique direction in reciprocal space (perpendicular to the axis of cylindrical symmetry of the preferred orientation). The purpose of this paper is to give a general treatment of the problem.

2. Theoretical

2.1 It is required to find the Fourier transform of an assembly of two-dimensional regular arrays (planes). It is assumed that there is no preferred orientation within the plane, that the angular distribution of the perpendiculars to the plane (the orientation distribution) against a fixed direction ('primary axis') is given by $g(\beta)$ but that there is no preferred orientation of the perpendiculars to the plane around the primary axis (cylindrical symmetry). The primary axis may be the fiber axis in the case of fibers or the perpendicular to the plane of deposition in the case of pyrolytic carbons, for example.

The Fourier transform of a two-dimensional regular array of points is a set of parallel rods, each of which can be represented by

$$I(\mathbf{s}) = \delta(\mathbf{s}_{12} - \mathbf{s}_h) \quad (2)$$

where \mathbf{s}_{12} is the projection of \mathbf{s} perpendicular to the rod. If there is no preferential orientation within the plane each rod goes over into a cylinder and the intensity distribution is

* Research sponsored in part by a United States Air Force Subcontract under Union Carbide Corporation's Prime Contract AF 33(615)-2760.