

meters of the oxygen ions which scatter comparatively poorly. The atomic positions are

$$x, y, \frac{1}{4}; \bar{x}, \bar{y}, \frac{3}{4}; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{3}{4}; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{4},$$

with the parameters

	x	y
Mn ⁺³	-0.036	0.140
O _I ⁻²	0.27	-0.20
O _{II} ⁻²	-0.21	-0.05

The values of F_{calc} in Table 1, obtained from these parameters, are in satisfactory agreement with F_{obs} .

Discussion

The average Mn⁺³-O⁻² distance is 2.06 Å, in satisfactory agreement with the sum of radii, 2.02 Å. (Pauling (1940, p. 350)). The average O⁻²-O⁻² distance is 2.9 Å, again in agreement with the expected value, 2.80 Å. (Pauling (1940, p. 350)).

Gruner (1947) has discussed the diaspore-goethite-groutite series and the boehmite-lepidocrocite-manganite series on the basis of unit-cell volumes. The member of each dimorph with the smaller cell volume is observed to be the more stable, presumably because the coulomb energy is greater for smaller inter-atomic distances. It may be of interest to add a possible explanation for the deviation of manganite from the second series, inasmuch as its true unit cell has about twice the a value and one-half of the b value of boehmite. The electronic configuration of Mn⁺³ is $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 3d^4$. Hund's rule places the four $3d$ electrons unpaired in four of the five $3d$ orbitals, leaving one $3d$ orbital unoccupied. The Mn⁺³ ion could then form partially ionic, partially covalent bonds of intermediate type; the covalent part would be of the square, coplanar dsp^2 type. It seems very likely that this is the case, because the structure of manganite (Buerger, 1936) actually has four oxygen

ions surrounding a manganese ion at distances of 1.85 to 1.92 Å. in a nearly square configuration, while the two other oxygen ions of the octahedron are at a distance of 2.30 Å. Bonding of this type is not possible for the Fe⁺³ ion because each of the $3d$ orbitals is occupied by an unpaired electron, and none is available for covalent contribution. In Al⁺³ the $3d$ orbitals are at much too high an energy level to be useful in this way.

While it is possible that this phenomenon contributes also to the stability of manganite as compared with groutite, it is also possible that such distortions of the oxygen octahedra occur in groutite as well. Again, because of the low scattering power of O⁻² compared with that of Mn⁺³, we did not think it profitable to try to refine the oxygen parameters in order to investigate this possibility.

We are very much indebted to Prof. John W. Gruner, who suggested that we undertake this problem, for supplying us with the groutite crystals. We wish to thank the Graduate School of the University of Minnesota for a grant in aid of this research.

References

- BUERGER, M. J. (1936). *Z. Krystallogr. A*, **95**, 163.
 DAVISSON, C. J. & HAWORTH, F. E. (1944). *Phys. Rev.* **66**, 351.
 EWING, F. (1935). *J. Chem. Phys.* **3**, 203.
 GRUNER, J. W. (1947). *Amer. Min.* **32**, 654.
Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen (1935). Berlin: Borntraeger.
 PABST, A. (1939). *Amer. Min.* **24**, 566.
 PAULING, L. (1940). *The Nature of the Chemical Bond*, 2nd ed. Cornell: University Press.
 RENNINGER, M. (1937). *Z. Phys., Lpz.*, **106**, 141.
 STOKES, R. G. (1947). *Amer. Min.* **32**, 670.

Acta Cryst. (1949). **2**, 106

Die Absorption der Röntgenstrahlen in Kristallen im Interferenzfall

VON M. VON LAUE

Max Planck Institut für Physik, Göttingen, Deutschland

(Eingegangen am 2. August 1948)

Experiments by Borrmann show that the absorption of the primary X-ray in a perfect crystal is affected, and sometimes reduced, by the presence of diffracted rays. The paper discusses the case where both the primary and the diffracted rays leave the crystal slab by the same face; the change of absorption of the primary ray is calculated according to the dynamical theory of X-ray diffraction and is found to be in general agreement with Borrmann's observations.

1. Problemstellung

Die dynamische Theorie der Röntgenstrahlinterferenzen dürfte im Allgemeinen ziemlich abgeschlossen sein; eine Folgerung aus ihr ist jedoch noch nie völlig durchdiskutiert worden, nämlich wie die Strahlen im Fall einer Interferenz absorbiert werden. Zwar weiss

man lange, dass in diesem Falle der gewöhnliche Absorptionskoeffizient gleich dem Brechungsindex seine Bedeutung verliert. Die *Wellenfelder*, welche dabei an die Stelle der einfachen ebenen Welle treten, erleiden grundsätzlich eine ganz andere Absorption. Nun ruft eine ebene Welle, wenn sie auf einen Kristall trifft, in

diesem zwei Wellenfelder hervor, die sich auch in der Absorption unterscheiden; und dies bedingt eine Komplikation der Verhältnisse, welche eine genaue Durchrechnung notwendig macht, sofern man die Intensität der in Fortsetzung der einfallenden aus dem Kristall wieder austretenden Welle angeben will.

Die dynamische Theorie sah zunächst von der Absorption ganz ab und kennzeichnete den Kristall durch eine dreifach periodische, *reelle* Funktion des Ortes, χ , welche zur Dichte der Elektronen proportional ist. Kohler (1933)* führte die Absorption in sie ein, indem er χ als komplexe Grösse betrachtete, ein Verfahren, welches Molière (1939*a, b, c*) wellenmechanisch untermauerte. Kohler interessierte sich nur für die abgebeugte Welle. Später jedoch zeigten Versuche von Borrmann (1941) über den Durchgang von Röntgenstrahlen durch dünne, streng einkristalline Schichten kennzeichnende Interferenzeinflüsse auch in der Intensität des direkt durchgehenden Strahls. In Anlehnung an einen älteren Versuch von Rutherford und Andrade (1914) lässt Borrmann nämlich ein weit geöffnetes Strahlenbündel auf die Schicht auftreffen und fängt es sodann auf einer photographischen Platte auf, sodass sich auf dieser, im Allgemeinen ziemlich gleichmässig geschwärzten Platte die Spuren der Strahlen, welche zu Interferenzen Anlass geben, deutlich abheben. Aber diese Spuren heben sich nicht etwa immer hell von ihrer Umgebung ab, wie man es bei dem älteren Versuche sah, sondern man bemerkt in ihnen ganz deutlich dunklere Stellen. Auch sind die rechts und links an sie angrenzenden Stellen nicht gleich geschwärzt, vielmehr sieht man an ihnen einen deutlichen Sprung in der allgemeinen Schwärzung des Untergrundes. Diese Erscheinung mit der Theorie in Zusammenhang zu bringen, ist der Zweck der folgenden Ausführungen.

2. Die Fourier-Koeffizienten von χ

Die drei Translationen des Raumgitters bezeichnen wir mit a_α , die des reziproken Gitters mit b_α ($\alpha = 1, 2, 3$); wir setzen

$$m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3 = b_m. \quad (1)$$

Unter r verstehen wir den Ortsvektor. Als 'Gitterfunktion' lässt sich χ in die dreifache Fourier-Reihe

$$\chi = \sum_m \chi_m \exp[-2\pi i(b_m r)] \quad (2)$$

entwickeln, in welcher der Index m abkürzend drei Summationszahlen m_1, m_2, m_3 vertritt. Ist χ reell, so sind die Koeffizienten

$$\left. \begin{aligned} \chi_m &= \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi \exp[2\pi i(b_m r)] d\tau, \\ \chi_{\bar{m}} &= \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi \exp[-2\pi i(b_m r)] d\tau \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

konjugiert komplex; insbesondere ist χ_0 (d.h. eigentlich χ_{000}) reell.

* Einen Vorläufer hat diese Arbeit in der Veröffentlichung von Prins (1930).

Jetzt aber haben wir an

$$\chi = \chi_r + i\chi_i \quad (4)$$

einen reellen und einen imaginären Teil, χ_r und χ_i , zu unterscheiden, ebenso bei χ_0 den reellen Teil

$$\chi_{0r} = \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi_r d\tau. \quad (5)$$

und den imaginären

$$\chi_{0i} = \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi_i d\tau.$$

Eine entsprechende Zerlegung lässt sich natürlich an jedem anderen Koeffizienten χ_h vornehmen. Wichtiger aber ist die Zerlegung

$$\chi_h = \chi'_{hr} + i\chi'_{hi} \quad (6)$$

in zwei durch die Gleichungen

$$\left. \begin{aligned} \chi'_{hr} &= \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi_r \exp[2\pi i(b_h r)] d\tau, \\ \chi'_{hi} &= \frac{1}{(a_1 a_2 a_3)} \int_{\text{Zelle}} \chi_i \exp[2\pi i(b_h r)] d\tau \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

bestimmte komplexe Summanden. Die Zweckmässigkeit dieser Zerlegung zeigt die Berechnung der im Folgenden immer wieder auftretenden Zahl

$$\chi_h \chi_{\bar{h}} = \phi_h + i\psi_h, \quad (8)$$

wobei $\phi_h = \chi'_{hr} \chi'_{\bar{h}r} - \chi'_{hi} \chi'_{\bar{h}i}$, $\psi_h = \chi'_{hr} \chi'_{\bar{h}i} + \chi'_{hi} \chi'_{\bar{h}r}$ (9)

ist. Weil χ_{hr} und $\chi_{\bar{h}r}$, χ_{hi} und $\chi_{\bar{h}i}$ konjugiert komplex sind, sind ϕ_h und ψ_h reell. Für die Interferenz h_1, h_2, h_3 sind χ_{0r}^0 und χ_{0i}^0 , ϕ_h und ψ_h die kennzeichnenden Zahlen. Suchen wir ihre Grössenordnungen abzuschätzen.

Zu diesem Zweck betrachten wir ein Wellenfeld mit nur einem starken Strahl in der Richtung des Einheitsvektors ε_0 . Die dynamische Theorie für nichtabsorbierende Kristalle bestimmt in diesem Fall den Wellenvektor \mathfrak{R} zu

$$\mathfrak{R} = (1 + \frac{1}{2} \chi_0) k \varepsilon_0, \quad (10)$$

wobei k das Reziproke der Wellenlänge λ bedeutet. Wir behalten diese Gleichung auch jetzt bei, wie wir auch später beim Interferenzfall auf bekannte Formeln der Theorie für den nichtabsorbierenden Kristall zurückgreifen werden.* Nur wird gleichzeitig mit χ_0 auch \mathfrak{R} komplex. Wir zerlegen \mathfrak{R} in den reellen Teil

$$\mathfrak{R}_r = (1 + \frac{1}{2} \chi_{0r}) k \varepsilon_0 \quad (11)$$

und den imaginären

$$\mathfrak{R}_i = \frac{1}{2} \chi_{0i} k \varepsilon_0. \quad (12)$$

Bei der Darstellung der Welle durch die Exponentialfunktion $\exp[-2\pi i(\mathfrak{R}r)]$ bekommt dann die Amplitude den Dämpfungsfaktor $\exp[\pi \chi_{0i} k(\varepsilon_0 r)]$, die Intensität

* Wir benutzen diese Formeln in der Gestalt welche sie bei von Laue (1941, Kapitel 5) haben; Gl. (10) entspricht der dortigen Formeln (27.2). Die Bezeichnungen in dieser Arbeit stimmen mit denen in meinem Buche überein bis auf eine: dort ist θ der ganze Abbeugungswinkel, hier der halbe, d.h. θ ist jetzt der Bragg'sche Glanzwinkel.

$\exp[2\pi\chi_{0i}k(s_0r)]$. Ausgedrückt durch den Absorptionskoeffizienten μ ist der letztere aber gleich

$$\exp[-\mu(s_0r)];$$

also gilt: $\chi_{0i} = -\mu/2\pi k = -\mu\lambda/2\pi < 0$. (13)

Für χ_{0r} wird man, wenigstens ausserhalb der Spektralbereiche anomaler Dispersion, welche die Absorptionskanten umgeben, die Berechnung aus der Zahl der Elektronen pro Volumeneinheit, N , nämlich

$$\chi_{0r} = -e^2 N \lambda^2 / \pi m e^2 \quad (14)$$

benutzen können, welche die die Absorption nicht berücksichtigende Theorie für χ_0 angibt (von Laue, 1941, Gl. (26·49)). Sie führt auf die Grössenordnung 10^{-5} ; für NaCl und die Wellenlänge $1,54 \times 10^{-8}$ cm. z.B. auf den Wert

$$\chi_{0r} = -1,36 \times 10^{-5}. \quad (14a)$$

χ_{0i} lässt sich nach (13) aus jeder Messung von μ ableiten. Wir geben in der folgenden Tabelle einige Zahlen; die μ Werte für Aluminium und Kupfer entstammen den *Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935, Bd. 2, S. 577 u.f.) die für Eisen und Zirkon der Absorptionskurve von Jönsson (1928) (von Laue, 1941, S. 10). Sie sind für den vorliegenden Zweck der Grössenordnungsbestimmung jedenfalls hinreichend genau.

	λ	μ	χ_{0i}
Al	$5,6 \times 10^{-9}$ cm.	$7,12 \text{ cm}^{-1}$	$-6,35 \times 10^{-9}$
	$2,3 \times 10^{-8}$	398	$-1,46 \times 10^{-6}$
Cu	$5,6 \times 10^{-9}$	235	$-2,1 \times 10^{-6}$
	$2,3 \times 10^{-8}$	$1,37 \times 10^3$	$-5,0 \times 10^{-6}$
Fe	$1,735 \times 10^{-8}$	$3,8 \times 10^3$	$-1,0 \times 10^{-5}$
Zr	$6,87 \times 10^{-9}$	710	$-7,8 \times 10^{-7}$
NaCl	$1,54 \times 10^{-8}$	153	$-3,75 \times 10^{-7}$

Auch die Berechnung für Natriumchlorid beruht auf der Jönsson'schen Kurve und setzt Additivität der Absorptionen des Natriums und des Chlors voraus.

Die beim Eisen und Zirkon gewählten Wellenlängen liegen dicht unter den Wellenlängen der K Kanten ($1,739 \times 10^{-8}$ cm. beim Fe, $6,872 \times 10^{-9}$ cm. beim Zr), also in Gebieten besonders starker Absorption und anomaler Dispersion. Die Tabelle weist darauf hin, dass man ausserhalb solcher Bereiche wohl immer χ_{0i} als klein gegen χ_{0r} betrachten darf. Beim Natriumchlorid und der Wellenlänge $1,54 \times 10^{-8}$ cm. z.B. ist

$$\chi_{0i}/\chi_{0r} = 2,76 \times 10^{-2}. \quad (15)$$

Von diesem Verhältnis der Mittelwerte χ_{0r} und χ_{0i} darf man wohl in vielen Fällen auf ein der Grössenordnung nach gleiches Verhältnis der Werte von χ_r und χ_i in jedem Punkt der Zelle schliessen. Aus (7) folgt dann $\chi_{hi} \ll \chi_{hr}$, und aus (9), dass man in dem Ausdruck für ϕ_h den zweiten Summanden vernachlässigen kann. Es ist also

$$\phi_h > 0, \quad |\psi_h| \ll \phi_h. \quad (16)$$

Sicher ist dieser Schluss freilich nicht. Immerhin dürfen wir bei der Interferenz 200 am NaCl, die wir

später als Beispiel betrachten wollen, wohl annehmen, dass die Fourierkoeffizienten

$$\chi_{200r} = \frac{1}{a^3} \int_0^a \int_0^a \int_0^a \chi_r \exp[4\pi i x_1/a] dx_1 dx_2 dx_3 \quad (17)$$

$$\text{und } \chi_{200i} = \frac{1}{a^3} \int_0^a \int_0^a \int_0^a \chi_i \exp[4\pi i x_1/a] dx_1 dx_2 dx_3$$

ungefähr der Proportion

$$\chi_{200i}/\chi_{200r} = \chi_{0i}/\chi_{0r} = 2,76 \times 10^{-2}$$

genügen; denn die Funktionen χ_r und χ_i sind hier im Wesentlichen auf die nächste Umgebung der Ebenen $x_1 = 0, \frac{1}{2}a$, und a beschränkt. Der Struktursymmetrie wegen ist ferner $\chi_{\bar{2}00r} = \chi_{200r}$, $\chi_{\bar{2}00i} = \chi_{200i}$. Dann folgt aus (9) und (15):

$$\psi_{200}/\phi_{200} = 2\chi_{0i}/\chi_{0r} = 5,52 \times 10^{-2}.$$

Auf solche Grössenordnungsbeziehungen gründen wir unser Näherungsverfahren. In dem schon erwähnten Beispiel aber setzen wir, um numerisch rechnen zu können:

$$\chi_{200r} = 0,9 \chi_0. \quad (18)$$

3. Die Absorption einzelner Wellenfelder

Fällt eine ebene Welle mit dem Wellenvektor $\mathfrak{R}_0^{(a)}$ auf die Vorderfläche $z=0$ einer bis zur Ebene $z=D$ reichenden Kristallplatte und zwar so, dass in dieser die Interferenz h_1, h_2, h_3 entsteht, so ruft sie im Allgemeinen zwei Wellenfelder in dieser hervor, jedes mit zwei starken Wellen; die Wellenvektoren des einen Feldes nennen wir \mathfrak{R}_{01} und \mathfrak{R}_{h1} , die des anderen \mathfrak{R}_{02} und \mathfrak{R}_{h2} . Für jedes Feld sind diese Vektoren verbunden durch die Gleichung

$$\mathfrak{R}_h = \mathfrak{R}_0 + \mathfrak{b}_h \quad (19)$$

und sie sind mit $\mathfrak{R}_0^{(a)}$ verbunden durch die 'Anpassungsgleichung'

$$\mathfrak{R}_0 = \mathfrak{R}_0^{(a)} - k\delta\mathfrak{z}, \quad (20)$$

in welcher \mathfrak{z} den Einheitsvektor in der positiven z Richtung bedeutet. Für die Zahl δ gibt die die Absorption nicht berücksichtigende Theorie die Gleichung

$$\delta = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\alpha_h}{\gamma_h} - \frac{1}{2} \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right\} \pm \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{\alpha_h}{\gamma_h} + \frac{1}{2} \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right]^2 + C^2 \frac{\chi_h \chi_{\bar{h}}}{\gamma_0 \gamma_h} \right\}^{1/2}. \quad (21)$$

(Siehe von Laue (1941, Gl. (28·9), (28·12a) und (28·12b)).) Hier bedeuten γ_0 und γ_h die Cosinus der Winkel zwischen \mathfrak{R}_0 , bzw. \mathfrak{R}_h und \mathfrak{z} , wie sie sich nach der geometrischen Interferenztheorie berechnen; sie sind also Konstanten, kennzeichnend für die Interferenz h_1, h_2, h_3 . C bedeutet entweder die Zahl 1 oder $|\cos 2\theta|$, wobei 2θ der nach der geometrischen Theorie zu berechnende Winkel zwischen \mathfrak{R}_h und \mathfrak{R}_0 ist, je nach dem Polarisationszustand. Schwingt die elektrische Feldstärke senkrecht zur Ebene der Vektoren \mathfrak{R}_0 und \mathfrak{R}_h (die wir hier, wie üblich, als mit der Einfallsebene zusammenfallend annehmen), so ist $C=1$; schwingt sie in dieser Ebene, so ist $C=|\cos 2\theta|$. Die Zahl α_h bestimmt den zwischen $\mathfrak{R}_0^{(a)}$ und \mathfrak{z} gelegenen Einfallswinkel ψ_0 ; ist ψ_{0k}

der Winkel, den die geometrische Theorie dafür angibt, so ist nämlich

$$\alpha_h = (\psi_0 - \psi_{0k}) \sin 2\theta. \quad (22)$$

(Siehe von Laue (1941, Gl. (28-8) u. (28-23)).)

Dass α_h nach der dynamischen Theorie in gewissen, wenn auch engen Grenzen variieren darf, zeigt an, dass nach dieser Theorie im Gegensatz zur geometrischen, aber in Übereinstimmung mit der Wirklichkeit, die Interferenz in einem endlichen Winkelbereich stattfindet.

Das Wellenfeld, für welches das positive Vorzeichen in (21) gilt, nennen wir das erste, das mit dem negativen Vorzeichen vor der Wurzel, das zweite Feld.

In der Durchführung der dynamischen Theorie hat man sodann die Fälle $\gamma_h < 0$ und $\gamma_h > 0$ zu sondern. Ist $\gamma_h < 0$, so tritt der abgebeugte Strahl auf der Vorderseite ($z=0$) der Kristallplatte aus; man findet Interferenz-Reflexion und die damit verbundene Extinction des Wellenfeldes, welche dies meist weit schneller auslöscht, als jede reguläre Absorption. Immerhin macht sich eine solche bei dieser Erscheinung bemerkbar, nicht nur in der Herabsetzung der im abgebeugten Strahl austretenden Energie, sondern auch, wie Kohler (1933) zeigte, in einer eigenartigen Unsymmetrie der Reflexionskurve. Einen durchgehenden Strahl gibt es in diesem Fall höchstens bei extrem dünnen Kristallschichten. Wir beschränken uns daher im Folgenden auf den Fall $\gamma_h > 0$, in welchem der abgebeugte Strahl ebenfalls auf der Rückseite ($z=D$) der Platte austritt.

Jetzt gehen wir, um die Absorption zu berücksichtigen, wie schon oben zu komplexen Werten von χ über. In (21) werden dann χ_0 und $\chi_h \times \chi_{\bar{h}}$ komplex und wir erhalten, nach (8),

$$\delta = \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha_h - \frac{1}{2}(\chi_{0r} + i\chi_{0i})}{\gamma_h + \gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right] \pm \frac{1}{2} \left[\left\{ \frac{\alpha_h + \frac{1}{2}(\chi_{0r} + i\chi_{0i})}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right\}^2 + \frac{C^2}{\gamma_0 \gamma_h} (\phi_h + i\psi_h) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (23)$$

Also wird auch die Zahl δ , welche bei reellem χ wegen $\gamma_h > 0$ stets reell wäre, komplex, und mit ihr nach (20) der Wellenvektor \mathfrak{R}_0 . Und zwar gilt, wenn wir am δ wie am \mathfrak{R}_0 die reellen von den imaginären Teilen durch die Indices r und i unterscheiden:

$$\mathfrak{R}_{0r} = \mathfrak{R}_0^{(a)} - k\delta_r \mathfrak{z}, \quad \mathfrak{R}_{0i} = -k\delta_i \mathfrak{z}. \quad (24)$$

Nun lautet die Darstellung der elektrischen Verschiebung im Wellenfelde mit zwei starken Wellen

$$\mathfrak{D} = \exp[-2\pi i(\mathfrak{R}_{0r})] \{ \mathfrak{D}_0 + \mathfrak{D}_h \exp[-2\pi i(\mathfrak{b}_h r)] \}. \quad (24a)$$

Das Hinzukommen des imaginären Teils \mathfrak{R}_{0i} bewirkt also das Auftreten eines Dämpfungsfaktors

$$\exp[-2\pi k\delta_i(\mathfrak{z}r)]$$

bei der Amplitude,

$$\exp[-4\pi k\delta_i(\mathfrak{z}r)]$$

bei der Intensität. Daher ist

$$\sigma = 4\pi k\delta_i \quad (25)$$

der Absorptionskoeffizient des Feldes. Ebenen gleicher Intensität sind dabei die Ebenen $z = \text{const.}$; dieser Koeffizient bezieht sich auf die z Koordinate. Bezogen auf die Richtung des einfallenden Strahls \mathfrak{R}_0 wäre $\gamma_0 \sigma$ der Absorptionskoeffizient. Jedoch ist eine solche Bezugnahme auf den einfallenden Strahl in gewissem Sinne unberechtigt, insofern doch im Wellenfelde beide Wellen gleichberechtigt sind.

Des Weiteren beschränken wir uns auf die oben begründete Annahme $\chi_{0i} \ll \chi_{0r}$ und $\psi_h \ll \phi_h$. Die in (23) auftretende Wurzel entwickeln wir nach steigenden Potenzen von χ_{0i} und ψ_h und lassen quadratische und höhere Entwicklungsglieder fort. Dann ist

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\alpha_h + \frac{1}{2}(\chi_{0r} + i\chi_{0i})}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right]^2 + \frac{C^2}{\gamma_0 \gamma_h} (\phi_h + i\psi_h) \Big]^{\frac{1}{2}} \\ &= \left[\frac{\alpha_h + \frac{1}{2}\chi_{0r}}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right]^2 + \frac{C^2}{\gamma_0 \gamma_h} \phi_h \Big]^{\frac{1}{2}} \\ &+ i \frac{\left\{ \frac{\alpha_h + \frac{1}{2}\chi_{0r}}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right\} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \chi_{0i} + \frac{C^2}{\gamma_0 \gamma_h} \psi_h}{2 \left[\frac{\alpha_h + \frac{1}{2}\chi_{0r}}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \right]^2 + \frac{C^2}{\gamma_0 \gamma_h} \phi_h} \Big]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Führt man also statt α_h die reelle Zahl

$$\beta_r = 2\alpha_h - \chi_{0r}(1 - \gamma_h/\gamma_0) = 2 \sin 2\theta (\psi_0 - \psi_{0m})^* \quad (26)$$

ein, so wird

$$\begin{aligned} \delta_r &= -\frac{\chi_{0r}}{2\gamma_0} + \frac{1}{4\gamma_h} \left\{ \beta_r \pm \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \\ \delta_i &= -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \chi_{0i} \pm \frac{\left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \beta_r \chi_{0i} + \frac{2C^2}{\gamma_0} \psi_h}{4 \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (27) \end{aligned}$$

Jetzt kennzeichnet die Zahl β_r die Richtung des Strahls $\mathfrak{R}_0^{(a)}$ und zwar so, dass $\beta_r = 0$ die Mitte des Interferenzbereichs ist, während $\alpha_h = 0$ nach (22) die Stelle angibt, an welche die geometrische Theorie das Interferenzmaximum verlegt; es ist plausibel, dass die dynamische Theorie besser mit β_r arbeitet.

In der Gleichung (27) für δ_i bezieht sich nach der obigen Verabredung das positive Vorzeichen auf das Wellenfeld No. 1, das negative auf das Feld No. 2. Die beiden von der einfallenden Welle gleichzeitig angeregten Wellenfelder erleiden also verschiedene Absorption. Wir unterscheiden auf der rechten Seite von Gl. (27) drei Summanden, die wir zunächst gesondert diskutieren.

Der erste Summand, $-\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \chi_{0i}$, ist das algebraische Mittel der Werte δ_i , die für den Strahl \mathfrak{R}_0 allein oder für \mathfrak{R}_h allein gelten müssten. Wäre nämlich \mathfrak{R}_0 allein da, so wäre nach (13) der auf die Richtung \mathfrak{R}_0 bezogene Absorptionskoeffizient

$$\gamma_0 \sigma = \mu = -2\pi k \chi_{0i}$$

* Siehe von Laue (1941, Gl. (28-13)). Der Einfallswinkel ψ_{0m} gibt die Mitte des Interferenzbereichs an.

und dies, in (25) eingesetzt, ergibt $\delta_i = -\frac{1}{2} \chi_{0i}/\gamma_0$; für \mathfrak{R}_h allein wäre entsprechend $\delta_i = -\frac{1}{2} \chi_{0i}/\gamma_h$.

Der zweite Summand

$$\pm \frac{\left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h}\right) \beta_r \chi_{0i}}{4 \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}}$$

vermittelt, wenn β_r von einem gegen $2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}$ grossen positiven zu einem ebenso grossen negativen Wert übergeht, zusammen mit dem ersten Summanden den Übergang von $\delta_i = -\frac{1}{2} \chi_{0i}/\gamma_h$ zu $\delta_i = -\frac{1}{2} \chi_{0i}/\gamma_0$. Und zwar ist im Feld No. 1 (+ Zeichen) der erste dieser Werte gültig bei positivem β_r , der zweite bei negativem β_r ; im Felde No. 2 ist es umgekehrt. Ferner ist der dritte Summand für so grosse β_r zu vernachlässigen. Dies lässt sich leicht verstehen. Aus der für nichtabsorbierende Kristalle gültigen Theorie lässt sich nämlich die Aussage übernehmen, dass bei so grossem β_r in jedem Felde ein Strahl weit überwiegt, \mathfrak{R}_h für Feld 1 und positives β_r , \mathfrak{R}_0 für Feld 2 und positives β_r .

Während der zweite Summand bei $\beta_r = 0$ verschwindet, hat der dritte,

$$\pm \frac{C^2 \psi_h}{2\gamma_0 \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}},$$

dort seinen absolut grössten Betrag, nämlich

$$\frac{C \psi_h}{4[\gamma_0 \gamma_h \phi_h]^{\frac{1}{2}}}.$$

Dieser tritt additiv oder subtraktiv zum ersten Summanden hinzu, verstärkt bei positivem ψ_h also die Absorption für das Feld No. 1, setzt sie entsprechend für Feld No. 2 herab, bei negativem ψ_h ist es umgekehrt. Auf diesem dritten Summanden beruht die Erklärung für die erwähnte Beobachtungstatsache, dass der Interferenzeinfluss eine weitgehende Verminderung der Absorption bewirken kann.

4. Das Zusammenwirken der beiden Wellenfelder

In der Erzeugung der beiden hinter der Platte zu beobachtenden Strahlen wirken beide Wellenfelder zusammen; um das Ergebnis berechnen zu können, müssen wir zunächst noch das einzelne Wellenfeld einer genaueren Betrachtung unterziehen. Es handelt sich dabei um das Verhältnis der Beträge der Vektoren \mathfrak{D}_0 und \mathfrak{D}_h welche in (24a) vorkommen; wir nennen diese D_0 und D_h .

In den Formeln, welche die dynamische Theorie unter Vernachlässigung der Absorption gibt, kommt eine Zahl τ mit folgender Definition vor:

$\tau = 1$ wenn der Vektor \mathfrak{D} in der Ebene der Strahlen \mathfrak{R}_0 und \mathfrak{R}_h liegt und zugleich $> \frac{1}{2}\pi$ ist.

$\tau = 0$ in allen anderen Fällen.

Die Theorie kennzeichnet ferner die Einfallrichtung durch die Grösse

$$\beta = 2\alpha_h - \chi_0(1 - \gamma_h/\gamma_0), \quad (28)$$

welche bei fehlender Absorption mit dem in (26) eingeführten β_r identisch ist; sobald man, wie wir es unten tun, β als komplex auffasst, ist β_r , wie schon der Index andeutet, der reelle Teil von β . Mit diesen Beziehungen gilt nun:

$$\left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{D_h}{D_0} = - \frac{\beta \pm \left[\beta^2 + 4C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}}}{2C(-1)^\tau \chi_{\bar{h}} [\gamma_h/\gamma_0]^{\frac{1}{2}}}. \quad (29)$$

Ferner formt jene Theorie diese Gleichung unter Einführung der Funktion v von β um:

$$\text{Sin } v = \frac{\beta}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \chi_h \chi_{\bar{h}} \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (30)$$

Dann gilt bei positivem Vorzeichen in (29), also für Feld No. 1:

$$\left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{D_h}{D_0} \right)_1 = -(-1)^\tau e^v \left[\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right]^{\frac{1}{2}},$$

bei negativem Vorzeichen, also für Feld No. 2:

$$\left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{D_h}{D_0} \right)_2 = +(-1)^\tau e^{-v} \left[\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (31)$$

(Siehe von Laue (1941, Gl. (28-18), (28-47) und (28-48)). Nur macht die letzte Gleichung von der hier fortfallenden Voraussetzung Gebrauch, dass χ_h und $\chi_{\bar{h}}$ konjugiert komplex sind.)

Nun können wir den Zusammenhang der beiden Wellenfelder mit der einfallenden Welle ermitteln, deren Amplitude wir mit $D_0^{(a)}$ bezeichnen. Dazu verhelfen uns die Grenzbedingungen für die Vorderfläche $z = 0$. Unterscheiden wir jetzt die beiden Felder durch die Indices 1 und 2, so lauten diese:

$$D_{01} + D_{02} = D_0^{(a)}, \quad D_{h1} + D_{h2} = 0. \quad (32)$$

Eliminiert man aus (31) und (32) einmal D_{h1} und D_{h2} , das andere Mal D_{01} und D_{02} , so folgt

$$D_{01} = \frac{e^{-v}}{2 \cos v} D_0^{(a)}, \quad D_{02} = \frac{e^{+v}}{2 \cos v} D_0^{(a)}. \quad (33)$$

(Vgl. von Laue (1941, Gl. (30-1) und (30-4)).)

$$[\gamma_h]^{\frac{1}{2}} D_{h1} = \frac{-(-1)^\tau}{2 \cos v} \left[\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right]^{\frac{1}{2}} [\gamma_0]^{\frac{1}{2}} D_0^{(a)},$$

$$[\gamma_h]^{\frac{1}{2}} D_{h2} = \frac{+(-1)^\tau}{2 \cos v} \left[\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right]^{\frac{1}{2}} [\gamma_0]^{\frac{1}{2}} D_0^{(a)}.$$

Jetzt betrachten wir wieder β als komplexe Zahl. Nach (30) wird dann auch v komplex ($v = v_r + v_i$); die Berechnung des imaginären Teils v_i brauchen wir nicht auszuführen, für den reellen aber gilt:

$$\text{Sin } v_r = \frac{\beta_r}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (34)$$

Die beiden rückseitig austretenden Strahlen $\mathfrak{R}_0^{(d)}$ und $\mathfrak{R}_h^{(d)}$ bilden sich aus diesen beiden Wellenfeldern an der hinteren Grenzebene $z=D$. Über ihre Amplituden geben die dort geltenden Grenzbedingungen Aufschluss; sie lauten:

$$\begin{aligned} D_{01} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{01z} D] + D_{02} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{02z} D] \\ = D_0^{(d)} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{0z}^{(d)} D], \\ D_{h1} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{h1z} D] + D_{h2} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{h2z} D] \\ = D_h^{(d)} \exp[-2\pi i \mathfrak{R}_{hz}^{(d)} D]. \end{aligned} \quad (35)$$

(Siehe von Laue (1941, Gl. (30·2)). Der Index z weist auf die z Komponenten der Vektoren \mathfrak{R} hin.)

Bildet man die absoluten Beträge der hier auftretenden komplexen Grössen, so erhält man nach (24) und (25)*

$$\begin{aligned} |D_0^{(d)}|^2 &= |D_{01} \exp[-\frac{1}{2}\sigma_1 D] \exp[-2\pi i k \delta_{r1} D] \\ &\quad + D_{02} \exp[-\frac{1}{2}\sigma_2 D] \exp[-2\pi i k \delta_{r2} D]|^2 \\ |D_h^{(d)}|^2 &= |D_{h1} \exp[-\frac{1}{2}\sigma_1 D] \exp[-2\pi i k \delta_{r1} D] \\ &\quad + D_{h2} \exp[-\frac{1}{2}\sigma_2 D] \exp[-2\pi i k \delta_{r2} D]|^2. \end{aligned} \quad (36)$$

Nun machen wir von (33) Gebrauch und bedenken, dass in unserer Näherung $|\mathfrak{C}os v|^2 = \mathfrak{C}os^2 v_r$ ist; so finden wir:

$$\begin{aligned} \frac{|D_0^{(d)}|^2}{|D_0^{(a)}|^2} &= \frac{\exp[-\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) D]}{4 \mathfrak{C}os^2 v_r} \{ \exp[2v_r + \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] \\ &\quad + \exp[-2v_r - \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] \\ &\quad + 2 \cos[2\pi k(\delta_{r1} - \delta_{r2}) D - 2v_r] \}, \end{aligned} \quad (37)^\dagger$$

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_h |D_h^{(d)}|^2}{\gamma_0 |D_0^{(a)}|^2} &= \frac{\exp[-\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) D]}{4 \mathfrak{C}os^2 v_r} \{ \exp[\frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] \\ &\quad + \exp[-\frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] - 2 \cos[2\pi k(\delta_{r1} - \delta_{r2}) D] \} \frac{|\chi_h|}{|\chi_0|}. \end{aligned} \quad (38)$$

In beiden Klammern $\{\}$ entspricht der erste Summand dem Wellenfelde No. 2, der zweite dem Feld No. 1.

Nach (25) und (27) ist

$$\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) = -(1/\gamma_0 + 1/\gamma_h) \chi_0 \pi k. \quad (39)$$

Nach dem zu Gl. (27) Gesagten entspricht dies dem Mittelwert der Absorptionskoeffizienten, welche für \mathfrak{R}_0 bzw. für \mathfrak{R}_h allein gültig wären. Der Faktor

$$\exp[-\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) D]$$

* δ_{r1}, σ_1 ergeben sich aus (27), wenn man das obere; δ_{r2}, σ_2 , wenn man das untere Vorzeichen gelten lässt. Dass in beiden Gleichungen (36) dieselben Exponenten vorkommen, liegt an der aus (19) folgenden Beziehung:

$$\mathfrak{R}_{h1} - \mathfrak{R}_{h2} = \mathfrak{R}_{01} - \mathfrak{R}_{02} = k(\delta_2 - \delta_1) \mathfrak{z}.$$

† Vgl. von Laue (1941, Gl. (30·5)). Entgegen der Erwartung wird die rechte Seite in (37) für $D=0$ nicht gleich 1, sondern gleich $1 - (\sin^2 v_r / \mathfrak{C}os^2 v_r)$. Da aber

$$v_r = \left\{ \frac{\beta_r \psi_h}{2\phi_h} - \chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right) \right\} \left\{ \beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right\}^{-\frac{1}{2}}$$

ist, bedeutet dies einen Fehler von der zweiten, hier durchweg vernachlässigten Ordnung.

vor den Klammern ist danach von β_r , d.h. von der Einfallrichtung, unabhängig. Weiter ist, wenn wir

$$\frac{\left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \beta_r \chi_0 \pi k}{\left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}} = \sigma', \quad \frac{2C^2 \psi_h \pi k}{\gamma_0} = \sigma'' \quad (40)$$

$$\text{setzen,} \quad \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) = \sigma' + \sigma''. \quad (41)$$

Ist $\psi_h > 0$, so hat für die Mitte des Interferenzbereichs, in welcher β_r und daher auch v_r Null sind, die erste Exponentialfunktion in (37) und (38) einen positiven, die zweite einen negativen Exponenten. Je grösser die Schichtdicke D ist, um so mehr überwiegt daher der erste Summand den zweiten und auch den dritten, mit dem Cosinus multiplizierten. Darin drückt sich die Tatsache aus, dass das zweite Feld weniger absorbiert wird, als das erste und schliesslich, bei hinreichend grossem D , allein übrig bleibt. Ist $\psi_h < 0$, so vertauschen die beiden Wellenfelder ihre Rollen.

Die Cosinustglieder in (37) und (38) können aus der weiteren Diskussion ausscheiden. Nach (27) ist nämlich

$$\delta_{r1} - \delta_{r2} = \frac{1}{2\gamma_h} \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}},$$

und der Minimalwert dieser Differenz, für $\beta_r=0$, beträgt

$\frac{C}{[\gamma_h \gamma_0]^{\frac{1}{2}}} [\phi_h]^{\frac{1}{2}}$. Dies ist von der Grössenordnung der Breite des Interferenzbereichs in Winkelmass, also bei stärkeren Interferenzen von der Grössenordnung 10^{-5} . Die Multiplikation mit $2\pi k$ macht daraus, wenn wir an Wellenlängen der Grössenordnung 10^{-8} cm. denken, 10^4 cm.⁻¹. Schwankt im Versuch also die Schichtdicke D um Beträge von 10^{-4} cm., so mittelt sich das Cosinustglied schon heraus; tatsächlich hat noch keine Beobachtung etwas von ihm merken lassen.

Sehen wir also von dem dritten Summanden in (38) ab, so erkennen wir als notwendige und hinreichende Bedingung für eine Symmetrie der abgelenkten Strahlungsintensität bezüglich der Stelle $\beta_r=0$, dass $\gamma_h = \gamma_0$ ist; denn in diesem Fall verschwindet σ' , und die Exponenten sind gerade Funktionen von β_r . Für den durchgehenden Strahl besteht nach (37) eine solche Symmetrie niemals, weil v_r eine ungerade Funktion von β_r ist; die Ursache dieser Unsymmetrie lassen die Gleichungen (33) für D_{01} und D_{02} erkennen: D_{02} wird stärker als D_{01} angeregt bei positivem β_r , das auch ein positives v_r zur Folge hat. Bei negativem β_r ist es umgekehrt. Und D_{01} wird nach dem Obigen anders absorbiert, als D_{02} .

Das Intensitätsmaximum liegt für den durchgehenden Strahl niemals bei $\beta_r=0$; denn nach (33) werden für diese Einfallrichtung beide Wellenfelder gleich stark angeregt. Günstiger für die Intensität ist es aber, wenn das schwächer absorbierte Feld stärker angeregt wird. Freilich rückt das Maximum um so näher der Stelle $\beta_r=0$, je grösser die Schichtdicke D wird; denn um so

weniger kommt es auf die Erregungsstärke der beiden Felder an.

Bei Kristallen ohne Symmetriezentrum ist der letzte Faktor auf der rechten Seite von (38), $|\chi_{\bar{h}}|/|\chi_h|$, von 1 verschieden. $|D_h^{(a)}|^2$ ist also unter sonst gleichen Umständen für die Interferenzen h_1, h_2, h_3 und $\bar{h}_1, \bar{h}_2, \bar{h}_3$ verschieden; darin äussert sich das bekannte Versagen der Friedelschen Regel für absorbierende Kristalle (von Laue, 1916; 1941, § 17b). Die Faktoren γ_0 und γ_h sind links hinzugefügt, weil wegen des verschiedenen Querschnitts beim einfallenden und dem abgebeugten Strahl $\gamma_0 |D_0^{(a)}|^2$ und $\gamma_h |D_h^{(a)}|^2$ das Mass der eingestrahlenen und abgebeugten Energie gibt.

5. Ein Beispiel

Besser als allgemeine Diskussion lässt wohl ein Beispiel die charakteristischen Züge dieser Theorie erkennen. Freilich erhebt sich dabei die Schwierigkeit, dass es bisher weder Messungen noch theoretische Berechnungsmethoden für die Fourierkoeffizienten χ_{hi} gibt; wir sind auf einigermaßen willkürliche Annahmen über sie angewiesen. Deswegen wählen wir als Beispiel die Interferenz 200 am NaCl für die Wellenlänge $1,54 \times 10^{-8}$ cm. und machen von der Abschätzung in (18) sowie von dem in der Tabelle angegebenen Wert $\mu = 153 \text{ cm}^{-1}$ Gebrauch. Ferner setzen wir $C = 1$, wie es der Schwingung senkrecht zur Ebene beider Strahlen entspricht; für die Schwingung in dieser Ebene fallen die Kurven der Figuren 2, 3, und 4 etwas flauer aus. Um nach (26) von den angegebenen Werten auf die Abweichung der Einfallrichtung zu schliessen, ist zu beachten, dass $\theta = 15,8^\circ$, also $\sin 2\theta = 0,525$ ist. Aus Symmetriegründen ist hier $\chi_{200} = \chi_{\bar{2}00}$.

Die Fig. 1 und 2 (a) beziehen sich auf den Fall, dass die Kristallschicht von Ebenen 111 begrenzt wird. In Fig. 1 sind gezeichnet: Erstens die Gerade

$$\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) = \frac{1}{2}(1/\gamma_0 + 1/\gamma_h)\mu$$

(siehe (39) und (13)); zweitens die Kurve

$$\sigma' = \frac{\left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0}\right) \beta_r \mu}{2 \left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}}$$

(siehe (40) und (13)); drittens die Kurve

$$\begin{aligned} \sigma'' &= \frac{\frac{2C^2}{\gamma_0} \psi_h \pi k}{\left[\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \phi_h \right]^{\frac{1}{2}}} = \frac{\frac{4}{\gamma_0} (0,9)^2 \chi_{0r} \chi_{0i} \pi k}{\left[\beta_r^2 + 4(0,9)^2 \chi_{0r}^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{-\frac{2}{\gamma_0} (0,9)^2 \chi_{0r} \mu}{\left[\beta_r^2 + 4(0,9)^2 \chi_{0r}^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]^{\frac{1}{2}}}; \end{aligned}$$

und viertens $\sigma' + \sigma'' = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2)$

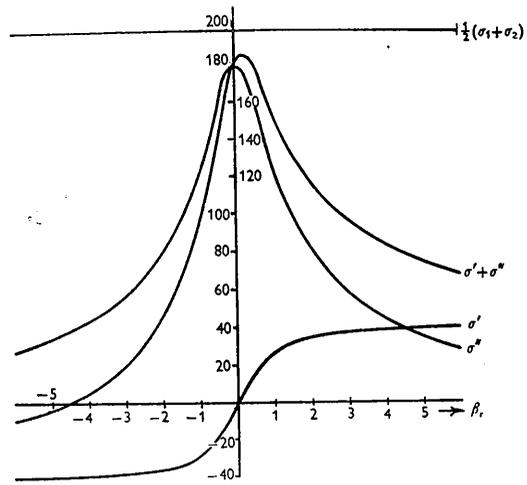


Fig. 1. Der Verlauf der Funktionen σ' und σ'' im Interferenzbereich dessen Mitte liegt bei $\beta_r = 0$. Einheit für σ' und σ'' : 1 cm^{-1} . Einheit für β_r : 2×10^{-5} .

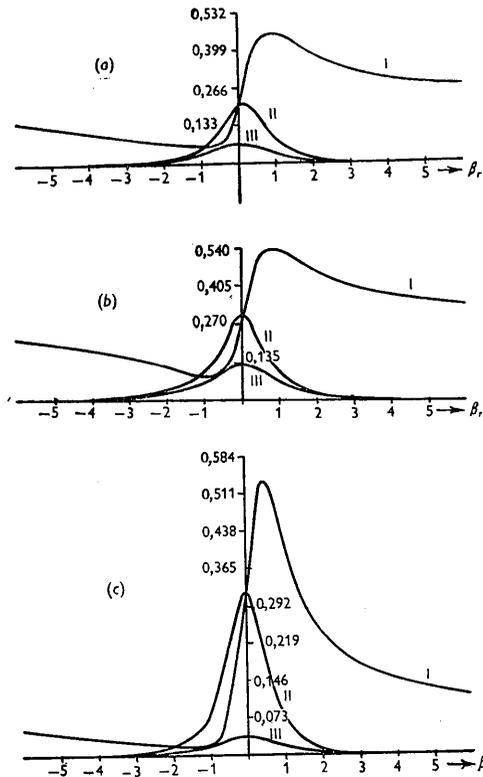


Fig. 2. I: Relative Intensität des direkt durchgehenden Strahls $|D_0^{(a)}|^2/|D_0^{(a)}|^2$ nach (37) ohne Berücksichtigung des Cosinusgliedes. II: Relative Intensität des abgebeugten Strahls $|D_h^{(a)}|^2/|D_0^{(a)}|^2$ nach (38) ohne Berücksichtigung des Cosinusgliedes. III: Amplitude des Cosinusgliedes in (37) und (38).

- (a) Grenzfläche 111; Dicke $D = 1 \times 10^{-2}$ cm.; Einheit für β_r : $2,00 \times 10^{-5}$.
- (b) Grenzfläche 010; Dicke $D = 1 \times 10^{-2}$ cm.; Einheit für β_r : $2,45 \times 10^{-5}$.
- (c) Grenzfläche 010; Dicke $D = 2 \times 10^{-2}$ cm.; Einheit für β_r : $2,45 \times 10^{-5}$.

(siehe (41)). Für das weniger absorbierte Wellenfeld No. 2 gibt die Differenz der Geraden und der vierten Kurve den Absorptionskoeffizienten; man erkennt, wie gering dieser in der Gegend von $\beta_r = \frac{1}{2}E$ ist. Die Einheit E , in welcher die Figur β_r misst, beträgt $2,0 \times 10^{-5}$. Dieselbe Einheit gilt auch für Fig. 2(a), welche für $D = 1 \times 10^{-2}$ cm. in Kurve I die rechte Seite von (37), in Kurve II die rechte Seite von (38) angibt, beide ohne das Cosinuglied. Die Amplitude des Cosinus, $\frac{1}{2}\cos^2 v_r$, gibt Kurve III; man erkennt, dass eine Berücksichtigung dieses dritten Gliedes an dem Verlauf der Figuren I und II qualitativ nichts änderte. Dass Kurve I und II sich genau im Punkt $\beta_r = 0$ schneiden, ist wegen $|\chi_{\bar{h}}| = |\chi_h|$ eine strenge Folgerung aus (37) und (38) und findet sich auch in den folgenden Figuren.

Fig. 2(b) und 2(c) sind unter der Voraussetzung berechnet, dass die Kristallschicht von zwei Würfel­flächen 010 begrenzt wird. In Fig. 2(b) ist die Schicht­dicke D zu 1×10^{-2} cm., in Fig. 2(c) zu 2×10^{-2} cm. angenommen. Die Kurven I, II und III haben dieselbe Bedeutung wie in Fig. 2(a). Ähneln sich die Figuren 2(a) und 2(b) weitgehend, so ist in Fig. 2(c) das Maximum viel stärker ausgeprägt und etwas näher bei $\beta_r = 0$. Die Einheit E für β_r ist in diesen Figuren $2,45 \times 10^{-5}$.

Zwar dürfen wir diese Kurven wegen der Willkür der

Gleichung (18) nicht als quantitatives Abbild der Wirklichkeit nehmen und müssen für einen Vergleich mit der Erfahrung auch noch berücksichtigen, dass sie für den anderen, im Experiment nicht abgetrennten Polarisationszustand (die elektrische Schwingung in der Ebene beider Strahlen) etwas flauer verlaufen. Aber sie stimmen doch qualitativ zu den erwähnten Beobachtungen Borrmann's und geben Grund zu der Hoffnung, dass weitere Untersuchung über die Absorption der Röntgenstrahlen volle Übereinstimmung zwischen Theorie und Erfahrung ergeben wird.

Schrifttum

- BORRMANN, G. (1941). *Phys. Z.* **42**, 157.
Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen (1935). Berlin: Borntraeger.
 JÖNSSON, E. (1928). Diss. Upsala.
 KOHLER, M. (1933). *Ann. Phys., Lpz.*, **18**, 265.
 VON LAUE, M. (1916). *Ann. Phys., Lpz.*, **50**, 433.
 VON LAUE, M. (1941). *Röntgenstrahlinterferenzen*. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft.
 MOLIÈRE, G. (1939a). *Ann. Phys., Lpz.*, **35**, 272.
 MOLIÈRE, G. (1939b). *Ann. Phys., Lpz.*, **35**, 297.
 MOLIÈRE, G. (1939c). *Ann. Phys., Lpz.*, **36**, 265.
 PRINS, J. A. (1930). *Z. Phys.* **63**, 477.
 RUTHERFORD, E. & ANDRADE, E. N. DA C. (1914). *Phil. Mag.* **28**, 263.

Acta Cryst. (1949). **2**, 113

A Punched-Card Modification of the Bevers-Lipson Method of Fourier Synthesis

BY MISS M. L. HODGSON

British Tabulating Machine Co. Ltd., Victoria House, London W.C. 1, England,

C. J. B. CLEWS AND W. COCHRAN

Crystallographic Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, England

(Received 5 November 1948)

A description is given of a punched-card system for Fourier synthesis which may be regarded as a mechanized version of the original Bevers-Lipson method, and which has been used successfully for the evaluation of two- and three-dimensional Fourier series.

Introduction

In X-ray crystal-structure analysis the calculation of electron-density distributions by Fourier synthesis is a frequently occurring task, for which the methods of Robertson (1936) and of Lipson & Bevers (1936) have been widely employed. Methods making use of a punched-card system have been described by a number of investigators (Shaffer, Schomaker & Pauling, 1946; Comrie and others (unpublished); Cox, Gross & Jeffrey, 1947). The method used by the American workers is elaborate and requires equipment not available in this country, while that used in connexion with work on

penicillin was on such a scale that it could be carried out only by a professional computing service. Cox and his collaborators have developed a method which can be operated by people not specially trained in the use of Hollerith equipment. It is not considered suitable for the evaluation of the electron density at points throughout the unit cell, but is used to explore the electron density over limited regions by means of sectional syntheses. The present scheme is based on the latter method, but is modified so as to resemble more closely the original method of Lipson & Bevers, of which it may be regarded as a mechanized and extended version.