

## Über die Röntgenstreuung an Kristallen mit Versetzungen.

### IV. Unvollständige Schraubenversetzung mit angrenzendem Stapelfehler

VON MANFRED WILKENS UND ALFRED SEEGER

*Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, Deutschland*

(Eingegangen am 24. Juni 1963)

The influence of partial dislocations bounding stacking faults on the X-ray diffraction pattern is studied. The special case of scattering by a partial screw dislocation along the axis of a cylindrical crystal is investigated in the kinematic approximation. The position of the centroid of the intensity of reflexion depends only on the area of the stacking fault, and not on the bounding screw dislocation. The stacking fault gives rise to a symmetric broadening of the tails (that is, of the asymptotic region), with a form factor determined by the width of the stacking fault. The partial dislocation produces an antisymmetric component of the intensity function in the asymptotic region. It depends in a complicated way on the scalar product of the Burgers vector of the dislocation and the reciprocal-lattice vector of the reflexion. It is shown that, in a Debye-Scherrer pattern of a specimen having random orientation, these antisymmetric contributions cancel each other to a large extent. The remaining antisymmetry has the same sign as the antisymmetry produced by coherent twin boundaries (twin stacking faults) in face-centred cubic structures.

Die Streuung von Röntgenstrahlen an Kristallen mit Stapelfehlern wurde bislang im Rahmen der Theorie der 'eindimensionalen Fehlordnung' behandelt (Wilson 1942; Hendricks & Teller, 1942; Jagodzinski, 1949*a,b*, 1954; Gevers, 1954). Dabei wird von der seitlichen Begrenzung der Stapelfehler abgesehen; dies ist gerechtfertigt, wenn die Ausdehnungen der Stapelfehler gross gegenüber dem mittleren Abstand benachbarter Stapelfehler sind. Paterson (1952) hat die erwähnten allgemeinen Ergebnisse auf Stapelfehler und kohärente Zwillingsgrenzen in kubisch-flächenzentrierten Kristallen angewendet. Kennzeichnet man die mit einem Stapelfehler verbundene Atomverschiebung durch den Vektor  $\mathbf{b}_S$  und den Beugungsvektor durch  $\mathbf{g}_0$ , so erhält man für eine statistische Anordnung von parallelen Stapelfehlern 1. Art ('intrinsic stacking-faults') folgende Resultate:

Reflexe mit  $(\mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{b}_S) = \text{ganzzahlig}$  werden durch die Stapelfehler nicht beeinflusst; alle anderen Reflexe werden in Richtung der Stapelfehlernormalen symmetrisch verbreitert und verschoben.

An die Patersonsche Arbeit hat sich in den letzten Jahren eine grössere Anzahl von experimentellen Untersuchungen über plastisch verformte kubisch-flächenzentrierte Metalle und Legierungen angeschlossen (siehe z.B. Warren, 1959). Bei den soeben genannten Anwendungen sind jedoch die Voraussetzungen der Theorie nicht ohne weiteres erfüllt. Bei der plastischen Verformung entstehen starke innere Verzerrungen (von Versetzungen herrührend), so dass man die Stapelfehler nicht als in ein ideales Gitter eingebettet ansehen kann. Ferner kann in Anbetracht der hohen Versetzungsdichten nicht ohne weiteres vorausgesetzt werden, dass die Stapelfehler genügend grosse seitliche

Ausdehnungen haben. Die Fragen nach dem Einfluss der Verzerrungen und der seitlichen Begrenzungen der Stapelfehler hängen eng zusammen; die Stapelfehler können ja nicht unvermittelt im idealen Gitter enden, sondern werden durch unvollständige Versetzungen (oder durch Korngrenzen) begrenzt.

Die im Vorstehenden aufgeworfene Fragestellung soll in dieser Arbeit an einem einfachen Modell untersucht werden, das sich, von erlaubten Vereinfachungen mathematischer Art abgesehen, im Rahmen der kinematischen Beugungstheorie streng behandeln lässt. Wir knüpfen an die Arbeiten von Wilson (1952), Suzuki (1955) und Wilkens (1962*a,b*) an, in denen die Beugungserscheinungen an kreiszylindrischen Kristallen mit einer vollständigen Versetzung in der Zylinderachse theoretisch untersucht werden. In der vorliegenden Arbeit wird eine unvollständige Schraubenversetzung behandelt, von der ausgehend ein Stapelfehler bis zu einer Mantellinie des Zylinders verläuft (Modell I). Dabei wird elastische Isotropie vorausgesetzt und angenommen, dass das Verzerrungsfeld der Schraubenversetzung durch den Stapelfehler nicht modifiziert wird. Das Verschiebungsfeld der Schraubenversetzung entnehmen wir der linearisierten Elastizitätstheorie. Bei der Anwendung auf vollständige Versetzungen bedeutet dies nach Wilson (1952), dass die Reflexe (symmetrisch) verbreitert und nicht verschoben werden. Reflexverschiebungen durch Versetzungen erhält man erst bei Verwendung der quadratischen Näherung für das Verschiebungsfeld (Wilkens, 1962*b*).

In einem ersten Abschnitt geben wir analog zu Wilson (1952) eine Integraldarstellung der Streuamplitude. In § 2 werden wir mit Hilfe einer Entwicklung der Streuamplitude nach Besselfunktionen die Ver-

schiebungen der Intensitätsschwerpunkte berechnen. Es wird ferner qualitativ diskutiert, welche Bereiche des reziproken Gitters für die Schwerpunktsverschiebung wesentlich sind. In § 3 berechnen wir die asymptotische Entwicklung der Streuamplitude für grosse Abstände von den reziproken Gitterpunkten des ungestörten Kristalls. Anhand dieser Entwicklung können jene Züge des Intensitätsverlaufes diskutiert werden, die unabhängig von den speziellen Eigenschaften des Kristallmodells, etwa der zylindrischen Gestalt, sind. Durch Vergleich mit einem versetzungsfreien Kristall, der einen durchgehenden Stapelfehler enthält (Modell II), erhalten wir insbesondere jene Effekte, die von der seitlichen Begrenzung der Stapelfehler durch unvollständige Versetzungen herrühren.

### 1. Die Streuamplitude

Wir betrachten Kristalle der Länge  $Z$  und mit Radius  $R$ . Die  $z$ -Achse legen wir in die Zylinderachse; im Zylinderquerschnitt werden neben den kartesischen Koordinaten  $x$  und  $y$  Polarkoordinaten  $r$  und  $\varphi$  gemäss

$$x = r \cos \varphi \quad y = r \sin \varphi \quad (1.1)$$

eingeführt. Die Elementarzelle ist kubisch primitiv mit der Gitterkonstante  $a$ . Die Atomlagen des ungestörten Gitters bezeichnen wir mit  $\mathbf{r}_0$ , diejenigen des gestörten Gitters mit

$$\mathbf{r}_v = \mathbf{r}_0 + \mathbf{w} \quad (1.2)$$

mit  $\mathbf{w}$  = Verschiebungsvektor.

Im Kristall (I) liegt in der Zylinderachse eine Schraubenversetzung mit dem Burgersvektor

$$\mathbf{b} = b[001] \quad (1.3)$$

und mit dem Verschiebungsfeld

$$\mathbf{w} = (1/2\pi) \mathbf{b}\varphi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (1.4)$$

Wir interessieren uns besonders für den Fall  $b/a$  = unganzzahlig, in dem sich an die Versetzung ein von dem positiven Ast der  $x$ -Achse ( $\varphi=0$ ) und der  $z$ -Achse aufgespannter Stapelfehler anschliesst.

Der Kristall (II) enthält anstelle der Teilversetzung einen den Zylinder in der  $x$ - $z$ -Ebene ganz durchziehenden Stapelfehler. Das entsprechende Verschiebungsfeld lautet:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= -\frac{1}{2}\mathbf{b} \text{ für } y \geq 0 \\ \mathbf{w} &= +\frac{1}{2}\mathbf{b} \text{ für } y < 0. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Im reziproken Gitter benützen wir die gleiche Koordinatenbezeichnungen wie Wilkens (1963).

Vektoren im reziproken Gitter lauten

$$\mathbf{g} = (g_x, g_y, g_z) = a^*(h, k, l) \quad (1.6)$$

( $a^* = 1/a$  = kubische Einheitslänge im reziproken Gitter).

Vektoren, die zu einem Reflex des ungestörten Gitters weisen, schreiben wir

$$\mathbf{g}_0 = (g_{x,0}, g_{y,0}, g_{z,0}) = a^*(h_0 k_0 l_0) \quad (1.7)$$

( $h_0, k_0, l_0$  = ganzzahlig = Millersche Indizes des Reflexes). Kleine Abweichungen von  $\mathbf{g}_0$  innerhalb der Ebenen  $g_z = g_{z,0}$ ,

$$g_x - g_{x,0} = G_x, \quad g_y - g_{y,0} = G_y, \quad (1.8)$$

werden auch durch Polarkoordinaten  $G_r, \beta$  ausgedrückt (Fig. 1):

$$G_x = G_r \cos \beta \quad G_y = G_r \sin \beta. \quad (1.9)$$

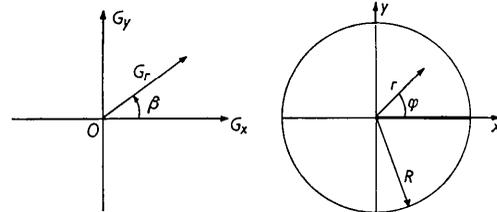


Fig. 1. Koordinatenbezeichnungen im Kristallgitter und im reziproken Gitter. Der verdickte Teil der  $x$ -Achse ist die Schnittlinie des Stapelfehlers mit dem Zylinderquerschnitt im Falle des Kristallmodells (I).

Zur Berechnung der Streuamplitude gehen wir in der gleichen Weise vor wie Wilson (1952). In der Summendarstellung der Streuamplitude

$$F = F_{\text{Atom}} \sum_{\text{Atome}} \exp 2\pi i(\mathbf{r}_v \cdot \mathbf{g}), \quad (1.10)$$

( $F_{\text{Atom}}$  = Atomstreuamplitude) schreiben wir

$$(\mathbf{r}_v \cdot \mathbf{g}) = (\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{g}_0) + (\mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{g} - \mathbf{g}_0)) + (\mathbf{w} \cdot \mathbf{g}_0) + (\mathbf{w} \cdot (\mathbf{g} - \mathbf{g}_0)). \quad (1.11)$$

Der erste Summand kann weggelassen werden, da er für alle Atome einen konstanten Phasenfaktor ergibt. Solange  $|\mathbf{g} - \mathbf{g}_0| \ll 1/a$  ist, kann der vierte Summand vernachlässigt werden. Die beiden mittleren Summanden sind dann von Atom zu Atom langsam veränderlich. Die Summation über den Zylinderquerschnitt kann deshalb durch eine Integration ersetzt werden. Über  $z$  lässt sich Gl. (1.10) direkt summieren, da  $\mathbf{w}$  nicht von  $z$  abhängt. Der dabei entstehende Faktor

$$F_z = \frac{\sin \pi Z g_z}{\sin \pi a g_z} = \frac{\sin \pi(Z/a)l}{\sin \pi l}, \quad \frac{Z}{a} = \text{ganzzahlig}, \quad (1.12)$$

begrenzt für hinreichend grosse  $Z/a$  die wesentlich von Null verschiedene Streuamplitude auf die Ebenen  $g_z = g_{z,0}$  bzw.  $l = l_0$ . Wir brauchen deshalb die explizite  $g_z$ -Abhängigkeit der Streuamplitude hinfort nicht weiter mitzuführen.

Ferner setzen wir die Atomstreuamplitude  $F_{\text{Atom}} = 1$ . Benützt man die Gl. (1.1) und (1.9), so schreibt sich die Streuamplitude für den Kristall (I)

$$F_I = \frac{R^2}{x^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{x/R} \exp(i[\xi \cos(\varphi - \beta) + \nu\varphi]) \xi d\xi d\varphi. \quad (1.13)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} \xi &= 2\pi r G_r; \quad \kappa = 2\pi R G_r; \\ \nu &= (b/a)l_0 = b g_{z,0} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{g}_0). \end{aligned}$$

Für die folgenden Untersuchungen ist es zweckmässig, in Gl. (1.13) die Integration über  $\varphi$  gesondert zu betrachten. Wir führen deshalb folgende Funktion  $\Phi_\nu$  ein:

$$\Phi_\nu(z, \beta) = \frac{e^{-i\nu\pi}}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp i[z \cos(\varphi - \beta) + \nu\varphi] d\varphi, \quad (1.14)$$

mit der sich die Streuamplitude

$$F_I = \frac{2\pi R^2}{\kappa^2} \exp(i\nu\pi) \int_0^\kappa \Phi_\nu(\xi, \beta) \xi d\xi \quad (1.15)$$

schreibt.

Für die Streuamplitude des Kristalls (II) definieren wir ganz analog eine Funktion  $\Psi_\mu$ ,

$$\Psi_\mu(z, \beta) = \frac{\exp(-i\mu\pi/2)}{\pi} \int_0^\pi \exp i[z \cos(\varphi - \beta) + \mu\varphi] d\varphi, \quad (1.16)$$

mit deren Hilfe  $F_{II}$  sich wie folgt ausdrückt:

$$F_{II} = \frac{\pi R^2}{\kappa^2} \left\{ e^{-i\nu\pi} \int_0^\kappa \Psi_0(\xi, \beta) \xi d\xi + e^{i\nu\pi} \int_0^\kappa \Psi_0^*(\xi, \beta) \xi d\xi \right\}. \quad (1.17)$$

Die Streuamplituden  $F_i$  ( $i=I$  oder  $II$ ) sind so normiert, dass die Integralintensität der Reflexe gleich dem Zylinderquerschnitt ist:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty |F_i|^2 G_r dG_r d\beta = \frac{1}{4\pi^2 R^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty |F_i|^2 \kappa d\kappa d\beta = R^2 \pi. \quad (1.18)$$

Die von uns mit  $\Phi_\nu$  und  $\Psi_\mu$  eingeführten Funktionen stellen Verallgemeinerungen der Anger-Weberschen Funktionen (Watson, 1944) und der von Nielsen (1904) mit  $\Phi^\nu(z)$  bezeichneten Funktionen dar, auf die sie sich für bestimmte Werte von  $\beta$  spezialisieren\*.

Zur weiteren Behandlung der Funktionen  $\Phi_\nu$  und  $\Psi_\mu$  schlagen wir zwei Wege ein.

(1) Entwicklung der Integranden in Gl. (1.14) und (1.16) nach Besselfunktionen. Die Integration über  $\xi$  in Gl. (1.15) und (1.17) führt dann auf spezielle Integrale über Besselfunktionen, die von Wilson (1952) bei der Behandlung der vollständigen Schraubenversetzung eingeführt worden sind. Auf diesem Wege ergeben sich Aussagen über die Schwerpunkte der Intensitätsfunktionen.

(2) Aufstellung von Rekursionsformeln und Differentialgleichungen für die  $\Phi_\nu$  und  $\Psi_\mu$ . Man erhält asymptotische Darstellungen der Streuamplituden bzw. der Intensitätsfunktionen  $|F_I|^2$  und  $|F_{II}|^2$  für grosse Abstände vom Reflexmittelpunkt.

\* Es gilt

$$\begin{aligned} \Phi_\nu(z, 0) &= (-i)^\nu \Phi^\nu(z), \quad \Phi_\nu(z, \pi/2) = J_\nu(z), \\ \Psi_\mu(z, \pi/2) &= (-i)^\mu [J_{-\mu}(z) - iE_{-\mu}(z)]. \end{aligned}$$

$J_\mu(z)$  und  $E_\mu(z)$  sind die Angerschen bzw. Weberschen Funktionen.

## 2. Die Verschiebung des Intensitätsschwerpunktes

Setzt man die Beziehung

$$\exp i\xi \cos \tau = J_0(\xi) + 2 \sum_{n=1}^\infty (i)^n J_n(\xi) \cos n\tau \quad (2.1)$$

in Gl. (1.14) ein und integriert über  $\varphi$ , so folgt

$$\Phi_\nu(\xi, \beta) = \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \sum_{n=0}^\infty [a_n \cos n\beta + ib_n \sin n\beta] J_n(\xi). \quad (2.2)$$

Dabei ist  $a_0 = (1/\nu)$ ;  $a_n = -2\nu(i)^n \frac{1}{n^2 - \nu^2}$ , ( $n \geq 1$ );

$$b_n = -2(i)^n \frac{n}{n^2 - \nu^2}.$$

Das Einsetzen in Gl. (1.15) führt auf die Funktionen

$$\begin{aligned} W_n(\kappa) &= \frac{1}{\kappa^2} \int_0^\kappa J_n(\xi) \xi d\xi = -\frac{1}{\kappa} J_{n-1}(\kappa) \\ &+ \frac{2n}{\kappa^2} \sum_{k=0}^\infty J_{n+2k}(\kappa), \quad (2.3) \end{aligned}$$

die Wilson (1952) unter dem Namen  $\frac{1}{2}K_n(\kappa)$  eingeführt hat. (Wir haben die Änderung der Bezeichnung vorgenommen, um Verwechslungen mit den modifizierten Hankelfunktionen zu vermeiden). Mit diesen Funktionen schreibt sich die Streuamplitude

$$F_I = 2\pi R^2 \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \sum_{n=0}^\infty [a_n \cos n\beta + ib_n \sin n\beta] W_n(\kappa). \quad (2.4)$$

Die analoge Berechnung von  $F_{II}$  liefert

$$\begin{aligned} F_{II} &= 2\pi R^2 \left\{ \cos \nu\pi W_0(\kappa) \right. \\ &+ \left. \frac{4 \sin \nu\pi}{\pi} \sum_{n=0}^\infty (-)^n \frac{1}{2n+1} \sin(2n+1)\beta W_{2n+1}(\kappa) \right\}. \quad (2.5) \end{aligned}$$

Wie man anhand von Gl. (2.4) und (2.5) leicht erkennt, sind die Intensitätsfunktionen  $|F_I|^2$  und  $|F_{II}|^2$  symmetrisch zur Richtung  $\beta = \pm\pi/2$ , d.h. symmetrisch zur  $G_y$ -Achse. Der Schwerpunkt der Intensitätsfunktionen liegt also auf der  $G_y$ -Achse. Wir bezeichnen ihn mit  $\bar{G}_y$  bzw. in den normierten Koordinaten mit

$$\bar{\kappa}_y = 2\pi R \bar{G}_y. \quad (2.6)$$

Es ist

$$\bar{\kappa}_y^{(i)} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\kappa_M} |F_i|^2 \kappa \sin \beta \kappa d\kappa d\beta / \int_0^{2\pi} \int_0^{\kappa_M} |F_i|^2 \kappa d\kappa d\beta. \quad (2.7)$$

Die obere Integrationsgrenze  $\kappa_M$  bestimmt sich aus der Forderung, dass die Integration etwa eine Zelle des reziproken Gitters umfassen soll. Das würde  $\kappa_M \cong \pi(R/a)$  bedeuten. Da  $R \gg a$  ist, kann man, solange man sich nicht ausdrücklich für die Abhängigkeit des Integrals von seiner oberen Grenze interessiert,  $\kappa_M = \infty$  setzen.

Entnimmt man  $F_I$  aus Gl. (2.4) so folgt nach der  $\beta$ -Integration wegen der Orthogonalität der trigonometrischen Funktion

$$\bar{\kappa}_y^{(1)} = \frac{\sin 2\pi\nu}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} C_{\nu,n}^{(1)} w_n(\kappa_M) \equiv \frac{\sin 2\pi\nu}{\pi} V_{\nu}^{(1)}(\kappa_M), \quad (2.8)$$

wobei

$$C_{\nu,n}^{(1)} = -(\nu/\pi) \operatorname{tg} \pi\nu \frac{(2n+1)^2}{[n^2 - \nu^2][(n+1)^2 - \nu^2]}$$

und

$$w_n(\kappa_M) = \frac{2}{2n+1} \int_0^{\kappa_M} W_n(x) W_{n+1}(x) x^2 dx.$$

Im Anhang wird gezeigt, dass

$$w_n(\infty) = 1 \quad (2.9)$$

ist. Ferner findet man durch Aufsummieren

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{\nu,n}^{(1)} = 1. \quad (2.10)$$

Damit ergibt sich für  $\kappa_M = \infty$

$$\bar{\kappa}_y^{(1)} = \sin 2\pi\nu/\pi. \quad (2.11)$$

In gleicher Weise folgt für das Kristallmodell (II)

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}_y^{(2)} &= \frac{2 \sin 2\pi\nu}{\pi} w_0(\kappa_M) \\ &= \frac{2 \sin 2\pi\nu}{\pi} \text{ für } \kappa_M = \infty. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Nach Paterson (1952) hängt die Schwerpunktsverschiebung der Reflexe mit der Stapelfehlerdichte  $\alpha$  zusammen. In unserer Schreibweise lautet sein Ergebnis

$$\bar{G}_y = \alpha \cdot (\sin 2\pi\nu/2\pi a_{st}), \quad (2.13)$$

wobei  $a_{st}$  der Abstand der zum Stapelfehler parallelen Netzebenen ist.

Entnimmt man die Schwerpunktsverschiebungen den Gl. (2.11) und (2.12), so liefert die Gl. (2.13) als Stapelfehlerdichten  $\alpha^{(1)}$  und  $\alpha^{(2)}$  unserer beiden Kristallmodelle

$$\alpha^{(1)} = a_{st}/R\pi \quad \alpha^{(2)} = 2a_{st}/R\pi. \quad (2.14)$$

Dies sind in der Tat die richtigen Werte für die Stapelfehlerdichten, nämlich die Stapelfehlerfläche ( $ZR$  bzw.  $2ZR$ ) geteilt durch die Gesamtfläche der Netzebenen parallel zum Stapelfehler ( $\pi R^2 Z/a_{st}$ )\*.

Von Interesse ist noch die Frage, welche Bereiche des reziproken Gitters den für die Schwerpunktsverschiebung massgeblichen antisymmetrischen Anteil der Intensitätsfunktion liefern. Um aus unseren zweidimensionalen Intensitätsfunktionen Aussagen zu gewinnen, die etwa mit den Verhältnissen bei Debye-

\* Paterson hat bei seinen Rechnungen eine statistisch unabhängige Verteilung der Stapelfehler vorausgesetzt. In diesem Fall ist die Verschiebung des Schwerpunktes gleich der Verschiebung des Maximums. Solange nur Verschiebungen der Intensitätsschwerpunkte und nicht Verschiebungen der Intensitätsmaxima betrachtet werden, ist der Verteilungszustand der Stapelfehler unerheblich, siehe z. B. Wilkens (1960). Deshalb darf Gl. (2.13) auch auf unsere Kristalle mit nur jeweils einem Stapelfehler angewandt werden.

Scherrer-Linienprofilen verglichen werden können, müsste  $|F_i|^2$  auf Kugelflächen  $|g| = \text{const.}$  aufintegriert werden. Eine solche Integration ist sehr schwierig. Für eine qualitative Untersuchung begnügen wir uns deshalb damit, die Ausdrücke  $V_{\nu}^{(1)}$  (vergl. Gl. (2.8)) und

$$V_{\nu}^{(2)}(\kappa_M) = w_0(\kappa_M) \quad (2.15)$$

als Funktion von  $\kappa_M$  zu betrachten und die Art der Einmündung in den Grenzwert 1 im Hinblick auf den antisymmetrischen Anteil der Intensitätsfunktionen zu diskutieren.

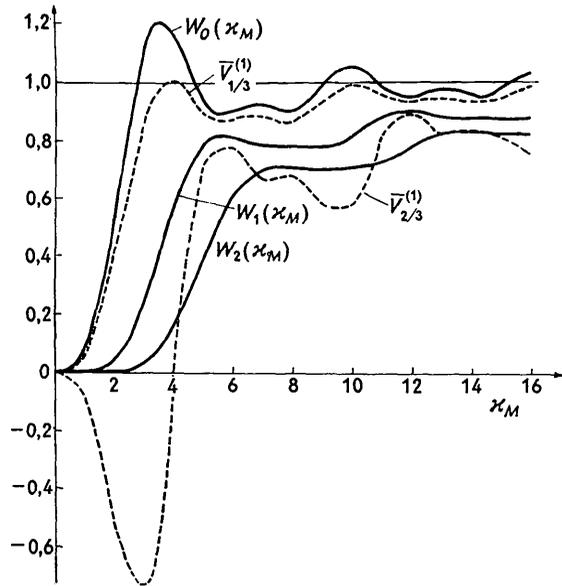


Fig. 2. Die Funktionen  $w_n(\kappa_M)$  nach Gl. (2.8) und die Funktionen  $V_{\nu}^{(1)}(\kappa_M)$  nach Gl. (2.18) für  $\nu = \frac{1}{3}$  und  $\frac{2}{3}$  für die Debye-Scherrer-Linien  $\{002\}$  und  $\{004\}$ .

Das Verhalten der Funktion  $V_{\nu}^{(1)}$  ist durch dasjenige der Funktionen  $w_n(\kappa_M)$  bestimmt. Fig. 2 zeigt als Beispiel die Funktionen  $w_0$ ,  $w_1$  und  $w_2$ , die durch numerische Integration gewonnen wurden. Der Grenzwert 1 wird um so später erreicht, je grösser der Index  $n$  ist. Abgesehen von dem 'Überschiessen' bei  $\kappa_M = 3$  hat  $w_0(\kappa_M)$  den Grenzwert etwa bei  $\kappa_M = 10$  erreicht, während  $w_1(\kappa_M)$  und  $w_2(\kappa_M)$  offenbar erst wesentlich später einmünden. Aus dem Umstand, dass  $V_{\nu}^{(2)}$  allein durch die rasch konvergierende Funktion  $w_0(\kappa_M)$  gegeben ist, während in  $V_{\nu}^{(1)}$  die Koeffizienten  $c_{\nu,n}^{(1)}$  mit steigendem  $n$  nur mit etwa  $n^{-2}$  abfallen, muss man schliessen, dass bei dem Kristall (II) die Intensitätsausläufer nahezu symmetrisch bleiben, während sie bei dem Kristall (I) wesentlich zur Schwerpunktsverschiebung beitragen.

Bei der Anwendung auf kubisch-flächenzentrierte Kristalle hat man Stapelfehler in  $\{111\}$ -Ebenen zu betrachten. Die Burgersvektoren der zugehörigen unvollständigen (Shockleyschen) Versetzungen sind

$$\mathbf{b} = \frac{a}{6} \langle 1 \ 1 \ \bar{2} \rangle. \quad (2.16)$$

$\nu = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{g}_0)$  ist in diesem Falle also ein ganzzahliges Vielfaches von  $\frac{1}{3}$ . Wir betrachten ein regellos verteiltes Kristallpulverpräparat. Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf die {002}- und die {004}-Debye-Scherrer-Linie, da diese Linien die einfachste Analyse der Intensitätsprofile zulassen (siehe Wagner, 1957).

Wir greifen einen festen Burgersvektor

$$\mathbf{b} = \frac{a}{6} [1 \ 1 \ \bar{2}] \quad (2.17)$$

heraus und mitteln über die verschiedenen  $\nu$ -Werte, die sich für die einzelnen Komponenten der Debye-Scherrer-Linien ergeben (Tabelle 1).

Tabelle 1.  $\nu$ -Werte für die verschiedenen Komponenten der Debye-Scherrer-Linien {002} und {004} mit dem Burgersvektor  $\mathbf{b}$  nach Gl. (2.17)

	(00h)	(0h0)	(h00)
{002}	$-\frac{2}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$
{004}	$-\frac{4}{3}$	$+\frac{2}{3}$	$+\frac{2}{3}$

Zur Betrachtung der resultierenden Asymmetrie schreiben wir

$$\overline{V}_\nu^{(1)}(\chi_M) = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{C}_{\nu, n}^{(1)} w_n(\chi_M), \quad (2.18)$$

wobei

$$\overline{C}_{\nu, n}^{(1)} = \frac{1}{3} \{ 2C_{\nu, n}^{(1)} + C_{-2\nu, n}^{(1)} \} \quad \begin{cases} \nu = \frac{1}{3} & \text{für } \{002\} \\ \nu = \frac{2}{3} & \text{für } \{004\} \end{cases}$$

ist. Wegen

$$\operatorname{tg} \pi \nu = -\operatorname{tg} 2\pi \nu \quad \text{für } \nu = \pm \frac{1}{3} \pmod{1}$$

ist

$$\overline{C}_{\nu, n}^{(1)} = \frac{-2\nu}{3\pi} \operatorname{tg} \pi \nu (2n+1)^2 \left\{ \frac{1}{[n^2 - \nu^2][(n+1)^2 - \nu^2]} - \frac{1}{[n^2 - 4\nu^2][(n+1)^2 - 4\nu^2]} \right\}. \quad (2.19)$$

Man sieht, dass die gemittelten Koeffizienten  $\overline{C}_{\nu, n}^{(1)}$  wesentlich rascher (für grosse  $n$  etwa wie  $n^{-4}$ ) gegen Null konvergieren als die ungemittelten. Fig. 2 zeigt  $\overline{V}_\nu^{(1)}$  für  $\nu = \frac{1}{3}$  und  $\frac{2}{3}$  unter Benützung der ersten drei Glieder der Reihe. Man erkennt, dass  $\overline{V}_{\frac{1}{3}}^{(1)}$  nur sehr wenig von  $\overline{V}_{\frac{1}{3}}^{(2)} = w_0(\chi_M)$  abweicht\*. Bei  $\overline{V}_{\frac{2}{3}}^{(1)}$  ist der Unterschied zwischen den beiden Kristallmodellen schon wesentlich grösser. Ganz allgemein kann aber aus der rascheren Konvergenz der Koeffizienten  $\overline{C}_{\nu, n}^{(1)}$ , verglichen mit derjenigen der  $C_{\nu, n}^{(1)}$ , geschlossen werden, dass in einem Pulverpräparat der Kristallart (I) mit regelloser Orientierungsverteilung der grössere Teil der von den unvollständigen Versetzungen her-

\* Für das Kristallmodell (II) erübrigt sich die Mittelung über verschiedene  $\nu$ -Werte.

rühenden Asymmetrie sich in den Intensitätsausläufern kompensiert.

### 3. Das Verhalten der Streuamplitude im asymptotischen Bereich

Im vorliegenden Abschnitt untersuchen wir zunächst die in § 1 eingeführten Funktionen  $\Phi_\nu(z, \beta)$  und  $\Psi_\mu(z, \beta)$  nach der in der Theorie der Zylinderfunktionen üblichen Methodik. Wir stellen die Rekursionsformeln und die Differentialgleichungen auf. Zusammen mit den Integraldarstellungen (Gl. (1.14) und (1.16)) liefern uns diese die asymptotischen Entwicklungen für grosse  $z$ . Mit diesen Hilfsmitteln ist es dann verhältnismässig einfach, die gesuchten Streuamplituden im asymptotischen Bereich in einer numerisch brauchbaren Form aufzustellen.

Wir können auf diese Weise die qualitativen Aussagen des § 2 über den antisymmetrischen Teil der Intensitätsausläufer präzisieren.

#### 3.1 Das Kristallmodell (II)

Wir beginnen mit dem versetzungsfreien Kristallmodell (II). Die durch Gl. (1.16) eingeführten Funktionen  $\Psi_\mu(z, \beta)$  gehorchen den Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} (\partial/\partial z) \Psi_\mu &= -\frac{1}{2} \Psi_{\mu+1} e^{-i\beta} + \frac{1}{2} \Psi_{\mu-1} e^{i\beta} \\ (\mu/z) \Psi_\mu &= \frac{1}{2} \Psi_{\mu+1} e^{-i\beta} + \frac{1}{2} \Psi_{\mu-1} e^{i\beta} \\ &\quad - 2 \sin(z \cos \beta - \frac{1}{2} \mu \pi) / \pi z \end{aligned} \quad (3.1)$$

oder den daraus ableitbaren Beziehungen

$$\begin{aligned} z^{-\mu} (\partial/\partial z) (z^\mu \Psi_\mu) &= \Psi_{\mu-1} e^{i\beta} - 2 \sin(z \cos \beta - \frac{1}{2} \mu \pi) / \pi z \\ z^\mu (\partial/\partial z) (z^{-\mu} \Psi_\mu) &= -\Psi_{\mu+1} e^{-i\beta} \\ &\quad + 2 \sin(z \cos \beta - \frac{1}{2} \mu \pi) / \pi z. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Ferner erfüllen die  $\Psi_\mu$  die inhomogene Besselsche Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} + \left( 1 - \frac{\mu^2}{z^2} \right) \right] \Psi_\mu &= \frac{2}{\pi} \left[ \sin \left( z \cos \beta - \frac{\mu \pi}{2} \right) \frac{\mu}{z^2} \right. \\ &\quad \left. + i \cos \left( z \cos \beta - \frac{\mu \pi}{2} \right) \frac{\sin \beta}{z} \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

deren allgemeine Lösung wir in der Form

$$\Psi_\mu(z, \beta) = A_1 H_\mu^{(1)}(z) + A_2 H_\mu^{(2)}(z) + Q_\mu(z, \beta) \quad (3.4)$$

schreiben.

$H_\mu^{(1)}(z)$  und  $H_\mu^{(2)}(z)$  sind die Hankelfunktionen erster bzw. zweiter Art, also Lösungen der homogenen Differentialgleichung.  $Q_\mu(z, \beta)$  sei jene partikuläre Lösung von Gl. (3.3), die keinen Anteil einer Zylinderfunktion enthält. Um die Konstanten  $A_1$  und  $A_2$  zu bestimmen, schreiben wir die Definitionsgleichung (1.16) in der Form

$$\Psi_\mu(z, \beta) = \frac{e^{i\mu\beta}}{\pi} \int_{-\beta}^{\pi-\beta} \exp[iz \cos \tau + i\mu(\tau - \pi/2)] d\tau. \quad (3.5)$$

Dehnt man den Integrationsweg ins Komplexe aus und integriert von  $-\beta+i\infty$  über  $-\beta$  und  $\pi-\beta$  bis  $\pi-\beta-i\infty$ , so entspricht dieser erweiterte Integrationsweg dem von Sommerfeld eingeführten Integrationsweg  $C_2$  zur Definition der Hankelfunktion erster Art, sofern die Bedingung  $0 < \beta < \pi$  erfüllt ist (vergl. Jahnke, Emde & Lösch, 1960). Daraus folgt

$$\Psi_\mu = \exp(i\mu\beta) H_\mu^{(1)}(z) + Q_\mu(z, \beta); \quad 0 < \beta < \pi. \quad (3.6)$$

Für  $-\pi < \beta < 0$  gelangt man über den Sommerfeldschen Integrationsweg  $C_3$  zu

$$\Psi_\mu = \exp(i\mu\beta) H_\mu^{(2)}(z) + Q_\mu(z, \beta); \quad -\pi < \beta < 0. \quad (3.7)$$

Die Integration über  $\xi$  in Gl. (1.17) kann mit Hilfe der Gl. (3.2) ausgeführt werden. Man erhält

$$\int_0^\infty \Psi_0(\xi, \beta) \xi d\xi = \exp(-i\beta) \left\{ \kappa \Psi_1(\kappa, \beta) - \frac{2 \sin(\kappa \cos \beta)}{\pi \cos \beta} \right\}. \quad (3.8)$$

Das asymptotische Verhalten der partikulären Lösungen  $Q_1$  erhalten wir durch den Reihenansatz

$$Q_1(\kappa, \beta) = \sum_{n=1}^\infty \kappa^{-n} \{ a_n \cos(\kappa \cos \beta) + b_n \sin(\kappa \cos \beta) \}, \quad (3.9)$$

dessen Koeffizienten für  $n=1$  und  $2$  sich durch Einsetzen in die Differentialgleichung (3.3.) als

$$a_1 = 0; \quad b_1 = 2i/\pi \sin \beta; \\ a_2 = (+2i/\pi \sin^3 \beta) \exp i\beta; \quad b_2 = 0 \quad (3.10)$$

ergeben.

Wir benötigen im Folgenden nur die Koeffizienten erster Ordnung und verzichten deshalb auf die Angabe des allgemeinen Entwicklungsgesetzes. Man findet aber leicht, dass der jeweils von Null verschiedene Koeffizient der Ordnung  $n$  einen Faktor  $(\sin \beta)^{-2n+1}$  enthält. Der Ansatz Gl. (3.9) konvergiert also um so schlechter, je kleiner  $\sin \beta$  ist. Wir schliessen deshalb hinfür den Winkelbereich  $|\sin \beta| \ll 1$  aus\*.

Damit erhalten wir schliesslich

$$\int_0^\infty \Psi_0(\xi, \beta) \xi d\xi = \kappa H_1^{(1)}(\kappa) + i \frac{2 \sin(\kappa \cos \beta)}{\pi \sin \beta \cos \beta} \\ + i \frac{2 \cos(\kappa \cos \beta)}{\pi \kappa \sin^3 \beta} + \dots; \quad 0 < \beta < \pi. \quad (3.11)$$

Für das Intervall  $-\pi < \beta < 0$  ist  $H_1^{(1)}$  durch  $H_1^{(2)}$  zu ersetzen. Zur Berechnung der Intensitätsfunktion  $|F_{11}|^2$  verwenden wir die asymptotische Näherung der Hankelfunktionen. Wir behalten durchweg nur Glieder bis  $\kappa^{-4}$  bei. Ausserdem wird über die mit der Periode  $\kappa=2\pi$  oszillierenden Glieder gemittelt. Letzteres ist gerechtfertigt, weil in jedem Kristallpräparat ein hinreichend breites Spektrum von 'Zylinderradien'  $R$  vorkommt. Es ergibt sich auf diese Weise

\* Der Fall  $\sin \beta = 0$  ist singular. Es gilt z.B.  $\Psi_0(z, 0) = J_0(z)$ , so dass in diesem Fall die rechte Seite in Gl. (3.8) durch  $\kappa J_1(\kappa)$  zu ersetzen ist.

$$|F_{11}|^2 = 4R^4\pi/\kappa^3 + 16R^4 \sin^2 \nu \\ \times [\sin^2(\kappa \cos \beta)/\kappa^4 \sin^2 \beta \cos^2 \beta] + \dots + . \quad (3.12)$$

Das erste von  $\nu$  und damit vom Stapelfehler unabhängige Glied beschreibt das asymptotische Verhalten der Teilchengrössenverbreiterung, die von dem endlichen Zylinderradius  $R$  herrührt (Wilkins, 1963). Das zweite Glied ist wie das erste Glied symmetrisch zum Ursprung und stellt eine zusätzliche 'scheinbare' Teilchengrössenverbreiterung dar, die vom Stapelfehler herrührt. Der in diesem Glied enthaltene Faktor

$$\frac{4R^2 \sin^2(\kappa \cos \beta)}{\kappa^2 \cos^2 \beta} = \frac{\sin^2(\pi 2RG_x)}{\pi^2 G_x^2}; \quad 2\pi RG_x = \kappa \cos \beta, \quad (3.13)$$

entspricht dem Formfaktor der Querausdehnung  $2R$  des Stapelfehlers.

Um einen Vergleich mit den bekannten Intensitätsfunktionen zu ermöglichen, die sich im Rahmen der Theorie der eindimensionalen Fehlordnung ergeben, integrieren wir  $|F_{11}|^2$  in Gl. (3.12) orthogonal auf die  $G_y$ -Achse:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |F_{11}|^2 dG_x = \frac{1}{2\pi R} \int_{-\infty}^{+\infty} |F_{11}|^2 d(\kappa \cos \beta) \Big|_{\kappa \sin \beta = \text{constant}} \\ = R^2 \pi \frac{1}{2\pi^2 G_y^2} \left\{ \frac{1}{T_R} + 2 \sin^2 \nu \pi \cdot \frac{\alpha^{(2)}}{a_{st}} \right\} + \dots + , \quad (3.14)$$

Dabei ist  $T_R = \frac{1}{2}\pi R$  die mittlere Teilchengrösse des Zylinderquerschnittes (Wilkins, 1963) und  $\alpha^{(2)} = 2a_{st}/R\pi$  die in § 2 eingeführte Stapelfehlerdichte. Die rechte Seite von Gl. (3.14) zeigt, dass auch im vorliegenden, sehr speziell gewählten Kristallmodell das bekannte Additionsgesetz von Stapelfehlerdichte und reziproker Teilchengrösse gilt. Den Gültigkeitsbereich der asymptotischen Näherung kann man von Wilkins (1963) übernehmen. Berücksichtigt man die gegenüber dem dortigen Kristallmodell zusätzliche Stapelfehlerverbreiterung, so gilt als untere Grenze für den asymptotischen Bereich etwa  $RG_y \gtrsim 1,5$ .

### 3.2 Kristallmodell (I)

Die Rekursionsformeln für die Funktionen  $\Phi_\nu(z, \beta)$  lauten

$$\frac{\partial}{\partial z} \Phi_\nu(z, \beta) = \frac{1}{2i} [\exp(-i\beta) \Phi_{\nu+1} + \exp(i\beta) \Phi_{\nu-1}] \\ \frac{\nu}{z} \Phi_\nu(z, \beta) = -\frac{1}{2i} [\exp(-i\beta) \Phi_{\nu+1} - \exp(i\beta) \Phi_{\nu-1}] \\ + \frac{\sin \nu\pi \exp(iz \cos \beta)}{\pi z} \quad (3.15)$$

bzw.

$$z^{-\nu} \frac{\partial}{\partial z} (z^\nu \Phi_\nu) = \frac{1}{i} \exp(i\beta) \Phi_{\nu-1} + \frac{\sin \nu\pi \exp(iz \cos \beta)}{\pi z} \\ z^\nu \frac{\partial}{\partial z} (z^{-\nu} \Phi_\nu) = \frac{1}{i} \exp(-i\beta) \Phi_{\nu+1} - \frac{\sin \nu\pi \exp(iz \cos \beta)}{\pi z}. \quad (3.16)$$

Aus den Rekursionsformeln folgt die inhomogene Besselsche Differentialgleichung

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} + \left( 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) \right] \Phi_\nu = \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \exp(iz \cos \beta) \left\{ \frac{\sin \beta}{z} - \frac{\nu}{z^2} \right\}. \quad (3.17)$$

Schreibt man Gl. (1.14) in der Form

$$\Phi_\nu(z, \beta) = (1/2\pi) \exp i\nu(\beta - \pi/2) \times \int_{-\beta}^{2\pi-\beta} \exp [iz \cos \tau + i\nu(\tau - \pi/2)] d\tau \quad (3.18)$$

und beschränkt  $\beta$  auf das Intervall  $0 < \beta < \pi$ , so kann der Integrationsweg zu dem Sommerfeldschen komplexen Integrationsweg  $C_1$  erweitert werden. Wir können deshalb schreiben

$$\Phi_\nu = \exp i\nu(\beta - \pi/2) J_\nu(z) + P_\nu(z, \beta), \quad 0 < \beta < \pi, \quad (3.19)$$

wobei die partikuläre Lösung von Gl. (3.17) mit  $P_\nu(z, \beta)$  abgekürzt ist. Aus Gl. (1.14) oder (3.18) lassen sich zwei Symmetriebeziehungen ableiten:

$$\begin{aligned} \Phi_\nu(z, \beta) &= \Phi_\nu^*(z, \beta + \pi) \\ \Phi_\nu(z, \beta) &= \Phi_{-\nu}(z, -\beta). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Als Ergänzung zu Gl. (3.19) für das Intervall  $-\pi < \beta < 0$  folgt daraus

$$\Phi_\nu(z, \beta) = \exp i\nu(\beta + \frac{1}{2}\pi) \cdot J_{-\nu}(z) + P_\nu(z, \beta); \quad -\pi < \beta < 0. \quad (3.21)$$

Die partikuläre Lösung  $P_\nu$  erhalten wir mit dem Ansatz

$$P_\nu(z, \beta) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n/z^n) \exp(iz \cos \beta) \quad (3.22)$$

aus Gl. (3.17). Auch hier ist der Fall  $\sin \beta = 0$  singularär. Wir klammern den Bereich  $|\sin \beta| \ll 1$  aus und erhalten

$$P_\nu = \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \exp(iz \cos \beta) \times \left\{ \frac{1}{z \sin \beta} + \frac{i \cos \beta - \nu \sin \beta}{z^2 \sin^3 \beta} + \dots \right\}. \quad (3.23)$$

Mit Hilfe von Gl. (3.16) erhält man

$$\int_0^\infty \Phi_\nu(\xi, \beta) \xi d\xi = i \exp i\beta \left\{ \kappa \Phi_{\nu-1}(\kappa, \beta) - \nu \int_0^\infty \Phi_{\nu-1}(\xi, \beta) d\xi - \frac{2 \sin \nu\pi \sin \frac{1}{2}\kappa \cos \beta}{\pi \cos \beta} \exp(i \frac{1}{2}\kappa \cos \beta) \right\}. \quad (3.24)$$

Das noch verbleibende Integral schreiben wir

$$\int_0^\infty \Phi_{\nu-1} d\xi = \int_0^\infty \Phi_{\nu-1} d\xi + \int_\infty^\infty \Phi_{\nu-1} d\xi. \quad (3.25)$$

Das erste Teilintegral lässt sich mit Hilfe von Gl. (2.2) bestimmen. Wegen

$$\int_0^\infty J_n(\xi) d\xi = 1, \quad (n > -1), \quad (3.26)$$

bleibt die Summe über vier trigonometrische Reihen, von denen die erste und die zweite ganz und die dritte teilweise aufsummiert werden kann. Da die Konvergenz in den uns interessierenden Fällen  $\nu = \frac{1}{2}$  und  $\nu = \frac{3}{2}$  gut ist, kann man die Restsummen durch ihr erstes Glied annähern. In dieser Näherung ergibt sich für  $-\frac{1}{2}\pi \leq \beta \leq \frac{1}{2}\pi$

$$\int_0^\infty \Phi_{\nu-1} d\xi = \frac{1}{2} \frac{\sin \nu\pi}{\cos \frac{1}{2}\nu\pi} \exp i(\nu-1)\beta - \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \times \left\{ \log \operatorname{tg} \left( \frac{1}{4}\pi + \frac{1}{2}\beta \right) + \frac{2(\nu-1)^2}{\nu(2-\nu)} \sin \beta - \frac{2i(\nu-1)}{\nu(2-\nu)} \cos \beta \right\}. \quad (3.27)$$

Im Winkelbereich  $\frac{1}{2}\pi \leq \beta \leq \frac{3}{2}\pi$  ergibt sich das Integral durch Anwendung der Gl. (3.20).

Beim zweiten Teilintegral in Gl. (3.25) braucht nur über die partikuläre Lösung  $P_\nu(\xi, \beta)$  integriert zu werden, da der Beitrag des Integrals über die Besselfunktion im weiteren Verlauf der Rechnungen zu vernachlässigen ist. Es ergibt sich

$$\int_0^\infty \Phi_{\nu-1} d\xi \cong \int_\infty^\infty P_{\nu-1} d\xi = -\frac{\sin \nu\pi}{\pi \sin \beta} \times \{ \operatorname{ci}(\kappa \cos \beta) + i \operatorname{si}(\kappa \cos \beta) + \dots \} \quad (3.28)$$

(wegen der Definitionen von Integralcosinus und -sinus  $\operatorname{ci}$  und  $\operatorname{si}$  siehe Jahnke, Emde & Lösch, 1960).

Für die gesamte Streuamplitude  $F_I$  erhält man schliesslich im Winkelbereich  $0 < \beta \leq \frac{1}{2}\pi$  und für  $\nu > 0$

$$\begin{aligned} F_I &= \frac{2\pi R^2}{\kappa^2} \left\{ i \exp i(\beta + \nu\pi) \frac{\sin \nu\pi}{\pi} \left[ \frac{-\pi\nu}{2 \cos \frac{1}{2}\nu\pi} \right. \right. \\ &\times \exp i(\nu-1)\beta + \nu \log \operatorname{tg} \left( \frac{1}{4}\pi + \frac{1}{2}\beta \right) + \frac{\nu \operatorname{ci}(\kappa \cos \beta)}{\sin \beta} \\ &+ \frac{2(\nu-1)^2}{2-\nu} \sin \beta - \frac{2i(\nu-1)}{2-\nu} \cos \beta + \frac{\nu i \operatorname{si}(\kappa \cos \beta)}{\sin \beta} \\ &\left. - \frac{\exp(i\kappa \cos \beta)}{\sin \beta} - \frac{2 \sin(\frac{1}{2}\kappa \cos \beta)}{\cos \beta} \exp(i \frac{1}{2}\kappa \cos \beta) \right] \\ &- \exp i\nu(\beta + \frac{1}{2}\pi) \kappa J_{\nu-1}(\kappa) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Im Winkelbereich  $-\frac{1}{2}\pi \leq \beta < 0$  ist das letzte Glied in der geschweiften Klammer durch  $+\exp i\nu(\beta + \frac{3}{2}\pi) \kappa J_{1-\nu}(\kappa)$  zu ersetzen. Bildet man die Intensität  $|F_I|^2$ , so kann man die Produkte zwischen der Besselfunktion und den übrigen Summanden vernachlässigen, da diese Produkte im asymptotischen Bereich mit der Periode  $\kappa = 2\pi$  um den Wert Null oszillieren. Das Quadrat der Besselfunktion ergibt nach Ausmittelung der Oszillationen wieder das Teilchengrössenglied in Gl. (3.12), für das wir uns im Folgenden nicht weiter interessieren.

Die restlichen acht Summanden bezeichnen wir in

der Reihenfolge, wie sie in Gl. (3.29) angegeben sind, mit  $S_1$  bis  $S_8$ . Bei der Bildung der Intensität  $|F_1|^2$  ergeben sie 36 verschiedene Produkte, die wir im Interesse der Kürze nicht alle einzeln behandeln wollen. Von den in  $\beta$  symmetrischen Intensitätsanteilen greifen wir nur den weitaus wichtigsten Term heraus, der aus dem Betragsquadrat des Summanden  $S_8$  entsteht:

$$|S_8|^2 = 16 \sin^2 \nu \pi R^4 \frac{\sin^2(\frac{1}{2}\nu \cos \beta)}{\nu^2(\nu \cos \beta)^2}. \quad (3.30)$$

Dieser Intensitätsbeitrag entspricht wieder der vom Stapelfehler herrührenden scheinbaren Teilchengrößenverbreiterung mit dem korrekten Formfaktor der Breite  $R$  des Stapelfehlers.

Neben dem symmetrischen Beitrag Gl. (3.30) betrachten wir nur noch die in  $\beta$  antisymmetrischen Anteile von  $|F_1|^2$ . Um deren Bedeutung besser beurteilen zu können, integrieren wir sie analog zu Gl. (3.14) auf die  $G_y$ -Achse und vernachlässigen alle Glieder, die in der aufintegrierten Form stärker als  $(\nu \sin \beta)^{-3}$  bzw.  $G_y^{-3}$  verschwinden<sup>†</sup>.

Zur Wiedergabe der antisymmetrischen Glieder benutzen wir die Abkürzung

$$\begin{aligned} A_{ij} \frac{\sin^2 \nu \pi}{2\pi^4 G_y^3} &= \int_{-\infty}^{+\infty} (S_i S_j^* + S_i^* S_j) dG_x \\ &= \frac{1}{R\pi} \int_0^\infty (S_i S_j^* + S_i^* S_j) d(\nu \cos \beta) \\ \nu \sin \beta &= 2\pi R G_y = \text{constant}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Man findet dann nach einigen Zwischenrechnungen, die wir der Kürze halber übergangen, in guter Näherung für die wesentlichen Vorfaktoren der zu  $G_y^{-3}$  proportionalen Glieder

$$\begin{aligned} A_{12} &= -\nu^2 \pi \left\{ \frac{1}{4} \pi (\log 2 + 1) \operatorname{tg} \frac{1}{2} \nu \pi - \frac{1}{3} (\nu - 1) \right\} \\ A_{14} &= -\frac{\nu(\nu - 1)^2 \pi}{2 - \nu} \left\{ \frac{1}{3} \operatorname{tg} \frac{1}{2} \nu \pi - \frac{1}{2} (\nu - 1) \right\} \\ A_{15} &= -\frac{2\nu(\nu - 1)\pi}{2 - \nu} \left\{ \frac{1}{3} + \frac{1}{16} (\nu - 1) \pi \cdot \operatorname{tg} \frac{1}{2} \nu \pi \right\} \\ A_{18} &= -\nu \pi \left\{ \log |\gamma 4\pi R G_y| - 1 + \frac{1}{4} (\nu - 1) \pi \operatorname{tg} \frac{1}{2} \nu \pi \right\} \\ A_{28} &= -\nu \pi \log |\gamma 4\pi R G_y| \\ A_{48} &= -\frac{2(\nu - 1)^2 \pi}{2 - \nu} \quad A_{78} = \pi \\ \log \gamma &= 0,577 = \text{Eulersche Konstante}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

<sup>†</sup> Einige der antisymmetrischen Produkte  $(S_i S_j^* + S_i^* S_j)$  enthalten die Faktoren  $\cos(\nu - 1)\beta$  oder  $\sin(\nu - 1)\beta$ . Da die uns interessierenden Produkte i. a. nur im Bereich  $\beta \simeq \pm \frac{1}{2}\pi$  wesentlich von Null verschieden sind, kann man diese Faktoren zur Erleichterung der Integration nach Potenzen von  $\cos \beta$  entwickeln. Dabei ist für  $\nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}$  oder  $\frac{4}{3}$  folgende lineare Näherung ausreichend:

$$\begin{aligned} \cos(\nu - 1)\beta &\simeq \sin(\frac{1}{2}\nu\pi) - (\nu - 1) \cos(\frac{1}{2}\nu\pi) \cos \beta + \dots + \\ \sin(\nu - 1)\beta &\simeq -\cos(\frac{1}{2}\nu\pi) - (\nu - 1) \sin(\frac{1}{2}\nu\pi) \cos \beta + \dots + ; \\ 0 &\ll \beta \leq \frac{1}{2}\pi. \end{aligned}$$

(Für  $-\frac{1}{2}\pi \leq \beta \ll 0$  ist bei  $\sin(\nu - 1)\beta$  das Vorzeichen der rechten Seite umzudrehen.)

Die übrigen antisymmetrischen Beiträge sind zu vernachlässigen. Man sieht, dass die Vorfaktoren i. a. in recht komplizierter Weise von  $\nu$  abhängen. Da wir aber nach § 3.1 im asymptotischen Bereich etwa mit  $2\pi R G_y \gtrsim 10$  rechnen können, überwiegen das Glied  $A_{28}$  und der erste Teil von  $A_{18}$ , die demnach im wesentlichen das asymptotische Verhalten des antisymmetrischen Teils der Intensitätsfunktionen bestimmen. Da beide Glieder proportional zu  $\nu$  sind, heben sie sich bei der analog zu § 2 durchzuführenden Mittelung für die Debye-Scherrer-Linien {002} und {004} eines regellos orientierten Kristallpräparates heraus. Es bleibt eine wesentlich verminderte Antisymmetrie, in Übereinstimmung mit den qualitativen Ergebnissen von § 2.

Zum Vergleich mit Gl. (3.14) geben wir abschliessend die auf die  $G_y$ -Achse aufintegrierte Intensitätsfunktion  $|F_1|^2$  in der von uns berechneten Näherung an:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |F_1|^2 dG_x &= \frac{R^2 \pi}{2\pi^2 G_y^2} \left\{ \frac{1}{T_R} + 2 \sin^2 \nu \pi \frac{\alpha^{(1)}}{a_{st}} \right\} \\ &+ \frac{\sin^2 \nu \pi}{2\pi^4 G_y^3} \overline{\Sigma A_{ij}} + \dots + . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Dabei haben  $T_R$  und  $\alpha^{(1)}/a_{st}$  dieselbe Bedeutung wie in Gl. (3.14).  $\overline{\Sigma A_{ij}}$  ist die Summe der Vorfaktoren von Gl. (3.31), die entsprechend § 2 und Tabelle 1 über verschiedene  $\nu$ -Werte gemittelt wurden. Man findet

$$\begin{aligned} A_{ij} &= +0,96 \text{ für } \{002\} \\ &= -5,95 \text{ für } \{004\}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Die Schwerpunktsverschiebungen  $\bar{x}_y^{(1)} = 2\pi R G_y^{(1)}$  nach Gl. (2.11) sind positiv für {002} ( $\nu = +\frac{1}{3}$  oder  $-\frac{2}{3}$ ) und negativ für {004} ( $\nu = +\frac{2}{3}$  oder  $-\frac{1}{3}$ ).

Bezogen auf die Mitte der Intensitätsfunktion des ungestörten Kristalls sind also die Intensitätsausläufer gegenüber der symmetrischen Verbreiterung erhöht jeweils auf derjenigen Seite, auf der für den gestörten Kristall der Intensitätsschwerpunkt liegt. Das bedeutet in Übereinstimmung mit den Ergebnissen in § 2, dass das Schwerpunktsintegral, als Funktion von  $\nu_M$  betrachtet, verzögert in seinen Grenzwert Gl. (2.11) einläuft.

#### 4. Diskussion

In der vorliegenden Arbeit haben wir untersucht, wie sich die seitliche Begrenzung eines Stapelfehlers im Kristallinnern (d. h. das Auftreten unvollständiger Versetzungen), die ja in der Theorie der eindimensionalen Fehlordnung von vornherein ausser Betracht gelassen wird, auf die Intensitätsfunktion der Röntgenstreuung auswirkt. Unser besonderes Augenmerk galt den folgenden beiden Fragen:

- (1) Wird die Verschiebung der Intensitätsschwerpunkte durch das Verschiebungsfeld der unvollständigen Versetzung beeinflusst?
- (2) Wie wirkt sich die unvollständige Versetzung auf die Form der Intensitätsfunktion aus?

Die erste Frage konnte in § 2 wie folgt beantwortet werden: Die die Stapelfehler begrenzenden unvollständigen Versetzungen haben keinen Einfluss auf die Schwerpunktsverschiebungen der Reflexe; diese ist proportional zur Fläche der Stapelfehler. Im Spezialfall der in kubisch-flächenzentrierten Kristallen auftretenden Stapelfehler ist der Proportionalitätsfaktor gleich dem von Paterson (1952) im Rahmen der eindimensionalen Fehlordnungstheorie für den Fall statistisch verteilter Stapelfehler gefundenen. Dieses Ergebnis ist physikalisch verständlich, da einerseits die unvollständige Versetzung die Diskontinuität (Gl. (1.5)) des Verschiebungsfeldes an der Stapelfehlerfläche unverändert lässt und andererseits das von uns benützte Verschiebungsfeld der unvollständigen Versetzung (Gl. (1.4)) zu keiner Gitteraufweitung führt.

Bevor wir auf die Ergebnisse zur zweiten Frage eingehen, sind einige Vorbemerkungen erforderlich. Wir haben unsere Untersuchungen auf den asymptotischen Bereich der Intensitätsfunktionen beschränkt, weil unsere Rechnungen sich auf sehr einfache Kristallmodelle stützen. Im asymptotischen Bereich ist die Interferenzwirkung zwischen verschiedenen, räumlich getrennten Kristallbaufehlern zu vernachlässigen (Wilkins, 1963), sodass in diesem Bereich unsere Ergebnisse auf kompliziertere Kristallmodelle übertragen werden können und damit wohl allgemeine Gültigkeit besitzen.

In § 3 haben wir die Intensitätsfunktionen im asymptotischen Bereich als Funktion zweier Koordinaten  $\kappa$  und  $\beta$  berechnet. Bei dem heutigen Stand der Experimentalmethode lassen sich jedoch, insbesondere bei plastisch verformten Kristallen, die Intensitätsfunktionen nur als Funktion einer Koordinate, etwa des Glanzwinkels  $\theta$  oder der Koordinate  $|\mathbf{g}| = 2 \sin \theta / \lambda$ , ausmessen (vergl. z.B. Debye-Scherrer-Aufnahmen). Um unsere Modellrechnung an diese experimentellen Gegebenheiten anzupassen, müsste die Intensitätsfunktionen eines Reflexes auf Kugelflächen  $|\mathbf{g}| = \text{konstant}$  oder, als meist gute Näherung, auf Flächen senkrecht zu  $\mathbf{g}_0$  aufintegriert werden. Der Einfachheit halber haben wir statt dessen die Intensität auf die  $G_y$ -Achse, d.h. auf die in der Mitte des Reflexes aufgetragene Richtung der Stapelfehlernormalen, aufintegriert. Man kann annehmen, dass diese Vereinfachung das Ergebnis nicht wesentlich beeinflusst. Die Umrechnung auf die Koordinaten des Debye-Scherrer-Verfahrens geben wir nicht, da sie in der gleichen Weise wie bei der eindimensionalen Fehlordnung erfolgt, siehe z.B. Warren (1959).

Wir behandeln zuerst den symmetrischen Anteil der von den Stapelfehlern herrührenden Verbreiterung in den Intensitätsausläufern. Bei beiden Kristallmodellen (I) und (II) ergab sich, dass dieser Anteil in seiner von  $\kappa$  und  $\beta$  abhängenden Darstellung Gl. (3.12) und Gl. (3.30) einen Formfaktor enthält, der der Querausdehnung  $R$  bzw.  $2R$  der Stapelfehler entspricht. Bei dem Kristallmodell (II) überrascht dies Ergebnis nicht, da der Stapelfehler bis an die äussere

Kristallbegrenzung reicht. Dass der gleiche Formfaktor auch beim Kristall (I), d.h. bei seitlicher Begrenzung durch unvollständige Versetzungen gilt, rechtfertigt mindestens im asymptotischen Bereich den Ansatz von Warren (1961), wonach die begrenzte seitliche Ausdehnung der Stapelfehler zu einem zusätzlichen Glied in der symmetrischen 'Teilchengrößenverbreiterung' führt.

Den Verlauf des antisymmetrischen Anteils in den Intensitätsausläufern haben wir in § 2 qualitativ und in § 3 quantitativ untersucht. Nach § 3.1 ergibt sich bei dem Kristallmodell (II) im asymptotischen Bereich kein antisymmetrischer, mit  $G_y^{-3}$  abfallender Anteil (vergl. Gl. (3.14)). Die entsprechenden Glieder in Gl. (3.31), (3.32) und (3.33) können also der Wirkung der unvollständigen Versetzung zugeschrieben werden. Für unvollständige Versetzungen eines bestimmten Burgersvektors ist der Hauptteil dieses antisymmetrischen Anteils proportional zu  $G_y^{-3} \log |4\pi R G_y|$ , d.h. es handelt sich um einen relativ langsam abfallenden Intensitätsbeitrag. Er sollte an Proben, die im wesentlichen nur (unvollständige) Versetzungen mit einigen wenigen Arten von Burgersvektoren enthalten (etwa in Einfachgleitung verformte Einkristalle) unter geeigneten Bedingungen zu beobachten sein. Im Falle von Pulverpräparaten kubisch-flächenzentrierter Kristalle mit regelloser Orientierungsverteilung kompensieren sich jedoch diese wesentlichen antisymmetrischen Glieder. Es bleibt in diesem Falle ein kleiner antisymmetrischer, mit  $G_y^{-3}$  abfallender Restanteil, der nach Gl. (3.33) nicht vom Radius  $R$  des Kreiszyllinders unseres Kristallmodells abhängt. In Übertragung auf kompliziertere Kristallmodelle kann man daraus schliessen, dass dieser Anteil unmittelbar von den unvollständigen Versetzungen herrührt und nur wenig von der Wechselwirkung mit räumlich benachbarten Kristallbaufehlern beeinflusst wird. (Man vergleiche hierzu Wilkins (1963), wo die gleiche Frage bezüglich vollständiger Versetzungen untersucht wird.) Das in § 3.2 gefundene Vorzeichen dieses antisymmetrischen Anteils stimmt mit demjenigen der antisymmetrischen Verbreiterung durch kohärente Zwillingsgrenzen (Wagner, 1957) überein. Beide Arten von antisymmetrischer Verbreiterung sollten sich jedoch durch ihre unterschiedliche Abhängigkeit von den Koordinaten im reziproken Gitter voneinander trennen lassen.

Nach Wilkins (1963) macht sich der Charakter der Versetzungen im asymptotischen Bereich der Debye-Scherrer Linienprofile nur in den Vorfaktoren bemerkbar. Unsere Modellrechnungen, die sich auf den einfachsten Typ einer unvollständigen Versetzung stützen, können deshalb — was das prinzipielle Erscheinungsbild betrifft — auf unvollständige Versetzungen anderen Charakters übertragen werden.

Als Anwendungsbeispiel für das Vorstehende diskutieren wir qualitativ den Fall, dass die Probe als hauptsächlich Gitterstörung Stapelfehlerbänder enthält. Die Gesamtfläche der Stapelfehlerbänder be-

stimmt den symmetrischen Anteil der Verbreiterung im asymptotischen Bereich, der entsprechend der Querausdehnung der Stapelfehlerbänder nach Warren (1961) modifiziert werden muss. Die Gesamtlänge der begrenzenden unvollständigen Halbversetzungen ergibt den mit der reziproken dritten Potenz des Abstandes von der Reflexmitte abfallenden antisymmetrischen Anteil, der also bei gegebener Stapelfehlerfläche um so grösser ist, je schmaler die Stapelfehlerbänder sind\*. Das Vorzeichen dieser Antisymmetrie ist so, dass, wie schon von Wilkens (1962c) vermutet wurde, bei gegebener Stapelfehlerfläche eine umso geringere Verschiebung der Intensitätsmaxima resultiert, je schmaler die Stapelfehlerbänder sind.

ANHANG

Das Integral

$$\int_0^\infty W_n(z)W_{n+1}(z)z^2 dz$$

Mit der Reihendarstellung Gl. (2.3) kann man das gesuchte Integral in vier Teilintegrale zerlegen.

$$\int_0^\infty W_n(z)W_{n+1}(z)z^2 dz = A + B + C + D . \quad (A.1)$$

Dabei ist

$$A = \int_0^\infty J_n(z)J_{n-1}(z) dz = \frac{1}{2} , \quad (A.2)$$

$$B = -2n \int_0^\infty \sum_{k=0}^\infty J_n(z)J_{n+2k}(z) \frac{dz}{z} = -1 , \quad (A.3)$$

$$C = -2(n+1) \int_0^\infty \sum_{k=0}^\infty J_{n-1}(z)J_{n+1+2k}(z) \frac{dz}{z} = 0 , \quad (A.4)$$

$$D = 4n(n+1) \int_0^\infty \sum_{k=0}^\infty \sum_{l=0}^\infty J_{n+2k}(z)J_{n+1+2l}(z) dz/z^2 = n+1 . \quad (A.5)$$

In Gl. (A.3) ist nur der Summand mit  $k=0$  von Null verschieden. Daraus folgt, dass in Gl. (A.4) alle Sum-

\* Bezüglich der vom Verzerrungsfeld der Versetzungen verursachten symmetrischen Verbreiterung im asymptotischen Bereich kann man die Ergebnisse von Wilkens (1963) übernehmen. Der Kürze halber gehen wir darauf nicht näher ein.

manden verschwinden. In Gl.(A.5) sind nur die Summanden mit  $k-1=0$  und  $k-1=1$  von Null verschieden. Die Doppelsumme reduziert sich deshalb auf zwei einfache Summen.

$$D = n(n+1) \sum_{k=0}^\infty \left\{ \frac{1}{(n+2k)(n+1+2k)} + \frac{1}{(n+1+2k)(n+2+2k)} \right\} = n+1 . \quad (A.6)$$

Zusammen ergibt sich

$$A + B + C + D = \frac{1}{2}(2n+1) . \quad (A.7)$$

Daraus folgt mit der Definition von  $w_n(\kappa_M)$  nach Gl. (2.8)

$$w_n(\infty) = 1 .$$

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des Schwerpunktprogrammes 'Kristallstrukturforschung' der Deutschen Forschungsgemeinschaft ausgeführt, der auch an dieser Stelle für die Förderung unserer Arbeiten gedankt sei.

Literatur

GEVERS, R. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 740.  
 HENDRICKS, S. B. & TELLER, E. (1942). *J. Chem. Phys.* **10**, 147.  
 JAGODZINSKI, H. (1949a). *Acta Cryst.* **2**, 201.  
 JAGODZINSKI, H. (1949b). *Acta Cryst.* **2**, 208.  
 JAGODZINSKI, H. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 17.  
 JAHNKE, E., EMDE, F. & LÖSCH, F. (1960). *Tafeln höherer Funktionen*. Stuttgart: Teubner.  
 NIELSEN, N. (1904). *Handbuch der Theorie der Cylinderfunktionen*. Leipzig: Teubner.  
 PATERSON, M. S. (1952). *J. Appl. Phys.* **23**, 805.  
 SUZUKI, T. (1955). Unveröffentlicht.  
 WAGNER, C. N. J. (1957). *Acta Metallogr.* **5**, 427.  
 WARREN, B. E. (1959). *Progr. Met. Phys.* **8**, 147.  
 WARREN, B. E. (1961). *J. Appl. Phys.* **32**, 2428.  
 WATSON, G. N. (1944). *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge Univ. Press.  
 WILKENS, M. (1960). *Z. Phys.* **158**, 483.  
 WILKENS, M. (1962a). *Phys. Stat. Sol.* **2**, 692.  
 WILKENS, M. (1962b). *Phys. Stat. Sol.* **2**, 1508.  
 WILKENS, M. (1962c). *Acta Cryst.* **15**, 161.  
 WILKENS, M. (1963). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 1718.  
 WILSON, A. J. C. (1942). *Proc. Roy. Soc. A*, **180**, 277.  
 WILSON, A. J. C. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 318.