

# Über die Erforschung der Versetzungsichte und Versetzungsanordnung in plastisch verformten Kristallen mit Hilfe der Kleinwinkelstreuung von Röntgen-Strahlen

Von ALFRED SEEGER

Aus dem Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, und dem Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart  
(Z. Naturforsch. **11 a**, 724—730 [1956]; eingegangen am 20. Juli 1956)

Die Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen in Kristallen spricht auf lokale Dichteschwankungen in Bereichen an, die um rund eine Größenordnung über derjenigen der interatomaren Abstände liegen. Die von den Versetzungen hervorgerufenen Dichteänderungen haben diese Eigenschaft und geben wohl zu der in kaltverformten Metallen auftretenden zusätzlichen Kleinwinkelstreuung Anlaß. Aus diesem Grunde erscheint die Untersuchung der Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen an kaltverformten Metallen als ein äußerst wirkungsvolles Hilfsmittel zur Ermittlung der Versetzungsichte und Versetzungsanordnung. Die Theorie der Streuung durch eine isolierte Versetzung wird für den bei kubisch-flächenzentrierten Metallen wesentlichen Fall durchgeführt, daß die Versetzung in zwei sogenannte Halbversetzungen aufgespalten ist.

## 1. Einleitung und allgemeine Diskussion

Es ist heute allgemein anerkannt, daß die Verfestigung verformter Kristalle oder kristalliner Werkstoffe auf einer Vergrößerung der Versetzungsichte während der Verformung beruht. Experimentelle Kenntnisse über die Zahl und Anordnung von Versetzungen in Kristallen sind sowohl für die Weiterentwicklung der Theorie der Kristallplastizität als auch für das Studium des Versetzungseinflusses auf andere, z. B. magnetische, Eigenschaften sehr erwünscht. Es gibt zwar einige von den schon erwähnten Eigenschaften unabhängige Untersuchungsmethoden, die Größenangaben für die *Versetzungsdichte* geben, z. B. Messungen der bei der Rekristallisation freiwerdenden Energie<sup>1</sup>, der Kristalldichte<sup>1,2</sup>, des elektrischen Widerstands und der Änderung des elektrischen Widerstands im Magnetfeld<sup>3</sup>. Die beiden letztgenannten ergeben z. Zt. wegen unserer ungenügenden Kenntnisse des elektrischen Widerstands einer Einzelversetzung nur Relativwerte für die Versetzungsichte und bedürfen somit einer „Eichung“ mit Hilfe eines weiteren Meßverfahrens; die beiden ersten Methoden liefern Absolutwerte für die Zahl der Versetzungen (natürlich mit einer ge-

wissen prinzipiellen Unsicherheit, da sich Versetzungen verschiedenen Charakters etwas verschieden verhalten), erlauben aber so gut wie keine Aussagen über die *Versetzungsanordnung*. Diese sollte vielmehr für eine quantitative Auswertung der Dichte- und Energiemessungen wenigstens in großen Zügen bekannt sein, da sie bei der Auswertung in beiden Fällen logarithmisch eingeht.

In jüngster Zeit haben sich eine Reihe von Arbeiten mit der Ermittlung der Versetzungsichte und Versetzungsanordnung aus thermischen<sup>4</sup> und chemischen<sup>5</sup> Ätzversuchen befaßt. Diese Methoden haben jedoch den Nachteil, daß sie nur die Verhältnisse an der Kristalloberfläche erfassen, die in quantitativer Hinsicht natürlich nicht typisch für das Kristallinnere zu sein brauchen. In der Tat gibt es Hinweise darauf, daß die Versetzungsichte unverformter oder geäquilibrer Kristalle unmittelbar unter der Kristalloberfläche wesentlich kleiner als im Kristallinnern ist.

Wir erwähnen hierzu nur den folgenden Versuch von ADAMS und COTTRELL<sup>6</sup>: Durch Zulegierung von etwa 1% Zink zu Kupfereinkristallen in einer Oberflächenschicht von etwa  $1\text{ }\mu$  Dicke konnte ein Streckgrenzeffekt bei der kritischen Schubspannung hervorgerufen werden.

<sup>1</sup> L. M. CLAREBROUGH, M. E. HARGREAVES u. G. W. WEST, Proc. Roy. Soc., Lond. A **232**, 252 [1955] sowie dort zitierte frühere Arbeiten.

<sup>2</sup> Wegen der Theorie sehe man H. STEHLE u. A. SEEGER, Z. Phys. **146**, [1956], im Druck.

<sup>3</sup> H. G. VAN BUREN, Colloquium on Deformation and Flow of Solids, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1956.

<sup>4</sup> A. A. HENDRICKSON u. E. S. MACHLIN, Acta Met. **3**, 64 [1955].

<sup>5</sup> W. R. HIBBARD jr. u. C. G. DUNN, Acta Met. **4**, 306 [1956]. Hier sowie bei A. SEEGER, Theorie der Gitterfehlstellen, in Handbuch der Physik, Bd. VII/1, Ziff. 86, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955, weitere Literaturangaben.

<sup>6</sup> A. H. COTTRELL, Deformation and Flow of Solids, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1956, S. 33.



Da reines Kupfer (ebenso wie die verwendeten Proben nach dem Abpolieren der Oberflächenschicht) keinen Streckgrenzeneffekt aufweist, zeigt dies, daß sich mit anwachsender Spannung zuerst die in der Oberflächenschicht befindlichen Versetzungen in Bewegung setzen. Da die zulegierten Zinkatome die Versetzungsbewegung zu behindern suchen, bedeutet dies, daß für die Versetzungen in der Nähe der Oberfläche die übrigen Bewegungshindernisse weniger wirksam als im Kristallinnern sein müssen. Nach unseren Vorstellungen über das Zustandekommen der kritischen Schubspannung in reinen Metallen<sup>7</sup> folgt daraus, daß die Versetzungsdichte an der Oberfläche wesentlich geringer als im Kristallinnern sein muß.

Zum Studium der eingangs erwähnten Probleme wird also eine Methode benötigt, welche Auskunft über die Versetzungsverteilung im gesamten Kristallvolumen gibt. Als ein derartiges Verfahren, das allerdings zu diesem Zwecke bis jetzt noch nicht verwendet wurde, soll in dieser Arbeit die *Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen durch Versetzungen* in Kristallen untersucht werden. An anderer Stelle<sup>8</sup> konnte gezeigt werden, daß diese Kleinwinkelstreuung eng mit den von den Versetzungen hervorgerufenen Änderungen der Kristalldichte zusammenhängt und von der experimentell beobachteten Art und Größenordnung<sup>9, 10, 11</sup> ist. Selbstverständlich können in der experimentell zu beobachtenden Kleinwinkelstreuung noch andere Beiträge enthalten sein, z. B. von der von NEYNHABER, BREMMER und BEEMAN<sup>12</sup> sowie WEBB und BEEMAN<sup>13</sup> diskutierten Art. Erforderlichenfalls sollte sich eine Trennung mit Hilfe geeigneter Versuchsführung (Temperaturvariation, Polarisationsmessungen o. ä.) erreichen lassen. Wir glauben dagegen nicht, daß zur Deutung der bis jetzt bekannten Experimente die von manchen Autoren gemachte ad-hoc-Annahme der Existenz großer Löcher in verformten Metallen notwendig ist.

Unter den üblichen Versuchsbedingungen erfäßt die Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen Variationen der Kristalldichte über Bereiche hinweg, die um etwa eine Größenordnung über den interatomaren Abständen liegen. In diese Größenordnung fällt die Aufspaltung vollständiger Versetzungen in sog. Halbversetzungen, die bei vielen flächen-

zentriert-kubischen Metallen eine so wesentliche Rolle spielt<sup>14</sup>. Aus diesem Grunde schien es erforderlich, eine quantitative Diskussion des Einflusses dieser Aufspaltung durchzuführen.

## 2. Die Dilatation in der Umgebung aufgespaltener Versetzungen

Untersucht man die durch das Verzerrungsfeld von Versetzungen hervorgerufenen Dilatationen, so muß man unterscheiden zwischen a) den sich auf Grund der linearen Elastizitätstheorie ergebenden Dilatationen und b) den erst aus einer Berücksichtigung höherer Glieder in der Spannungs-Dehnungsbeziehung folgenden Dilatationen. Bezeichnet  $\varrho$  den Abstand von einer einzelnen geraden Versetzungsline, so variieren die unter a) aufgeführten Dilatationen mit dem Abstand wie  $\varrho^{-1}$ . (Dies gilt streng auch für elastisch anisotrope Medien.) Die Winkelabhängigkeit ist derart, daß das über das ganze Kristallvolumen genommene Integral über die Dilatation Null ist; d. h., daß eine Versetzung nach der linearen Elastizitätstheorie keine resultierende Dichteänderung erzeugt. Für eine Schraubenversetzung in einem elastisch isotropen Medium, die ja ein rotationssymmetrisches Verzerrungsfeld besitzt, folgt daraus das bekannte Ergebnis, daß sie in dieser Näherung überhaupt keine Dilatationen hervorruft.

Da nach der linearen Elastizitätstheorie die Verzerrungskomponenten wie  $\varrho^{-1}$  variieren, sind die unter b) aufgeführten nichtlinearen Dilatationen für große  $\varrho$ , wo Glieder dritten Grades neben denen zweiten Grades vernachlässigt werden können, proportional zu  $\varrho^{-2}$ . Für Abstände  $\varrho$ , die von der Größenordnung der Versetzungssstärke  $b$ , also des interatomaren Abstandes sind, erwartet man stärkere Abweichungen von diesem Grenzgesetz, und zwar im Sinne einer Verringerung des Betrags der Dilatation. Integriert man über das ganze Kristallvolumen, so überwiegen die Dilatationsgebiete über die Kompressionsbereiche; man erhält also in jedem Falle eine resultierende Dichteänderung, und zwar

<sup>7</sup> A. SEEGER, Z. Naturforschg. **9a**, 758, 870 [1954].

<sup>8</sup> A. SEEGER, Acta Met., im Druck.

<sup>9</sup> J. BLIN u. A. GUINIER, C. R. Acad. Sci. Paris **233**, 1288 [1951].

<sup>10</sup> J. BLIN u. A. GUINIER, C. R. Acad. Sci. Paris **236**, 2150 [1953].

<sup>11</sup> J. BLIN, Report Conference Defects in Solids, The Physical Society, London 1955, S. 420.

<sup>12</sup> R. H. NEYNHABER, W. G. BREMMER u. W. W. BEEMAN, Phys. Rev. **99**, 615 [1955].

<sup>13</sup> M. B. WEBB u. W. W. BEEMAN, Bull. Amer. Phys. Soc. **1**, 138 [1956].

<sup>14</sup> Siehe A. SEEGER, Theorie der Gitterfehlstellen, in Handbuch der Physik Bd. VII/1, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955.

im Sinne einer Verkleinerung der mittleren Kristalldichte.

Zur diffusen Streuung von RÖNTGEN-Strahlen bei kleinen Streuwinkeln tragen die sich auf Grund der linearen Rechnung ergebenden Dilatationen und Kompressionen nur sehr wenig bei, da diese ja zu keinen integralen Änderungen der Kristalldichten Anlaß geben. Wesentlich sind hier die „nichtlinearen“ Verzerrungen. Frühere Autoren<sup>11, 15</sup> hatten dies nicht beachtet und deswegen keine mit dem Experiment verträglichen theoretischen Resultate erhalten. Wir wollen hier unser Augenmerk vor allem auf die nichtlinearen Dilatationen richten.

Diese sind bis jetzt nur bei nicht in Halbversetzungen aufgespaltenen Schraubenversetzungen in elastisch isotropen Medien näher erforscht worden<sup>2</sup>. Es wurde folgender Näherungsausdruck für die Dilatation  $\Delta(r)$  erhalten:

$$\mathcal{A}(r) = \begin{cases} \frac{b^2 K}{4\pi} \frac{1}{\varrho^2} & \text{für } \varrho > \varrho_0, \\ \frac{b^2 K}{4\pi} \frac{1}{\varrho_0^2} & \text{für } \varrho \leq \varrho_0. \end{cases} \quad (1)$$

Hier bedeutet  $q_0$  einen Abschneideradius von der Größenordnung  $b/3$  ( $b$  = Atomabstand – wir haben uns in Gl. (1) auf ein Translationsgitter beschränkt) und  $K$  eine die Abweichungen vom HOOKE'schen Gesetz messende Konstante, die nach Ausweis von Theorie<sup>2</sup> und Experiment<sup>16</sup> für Nickel etwas größer als Eins und für Kupfer etwas kleiner als Eins ist.

Geht man nunmehr zu Schraubenversetzungen über, die in Halbversetzungen aufgespalten sind, so behält Gl. (1) ihre Gültigkeit für Abstände  $q$ , die groß gegen den Abstand  $2c$  der Halbversetzungen sind. Eine deduktive Behandlung der Verhältnisse bei kleinen  $q$  würde die Betrachtung von Versetzungen mit teilweisem Stufencharakter erfordern, da ja die Halbversetzungen keine reinen Schraubenversetzungen mehr sind. Dementsprechend müßten auch die „linearen“ Dilatationen mit in Betracht gezogen werden. Um Komplikationen bei der rechnerischen Ermittlung der Kleinwinkelstreuung zu vermeiden, schlagen wir einen anderen Weg ein: Wir legen einen mathematisch gut behandelbaren Dilatationsverlauf zugrunde, der für große  $q$  mit Gl. (1) gleichwertig ist, für kleine  $q$  vom Grenzgesetz in der richtigen Richtung abweicht und die richtige integrale

Volumänderung ergibt, worauf es ja vor allem ankommt. Ein derartiger Verlauf ist durch

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \frac{b^2 K}{4 \pi} \frac{1}{\varrho_1 \varrho_2} \quad (2)$$

gegeben, wo  $\varrho_1$  und  $\varrho_2$  die Abstände von den beiden Halbversetzungen sind (Abb. 1).

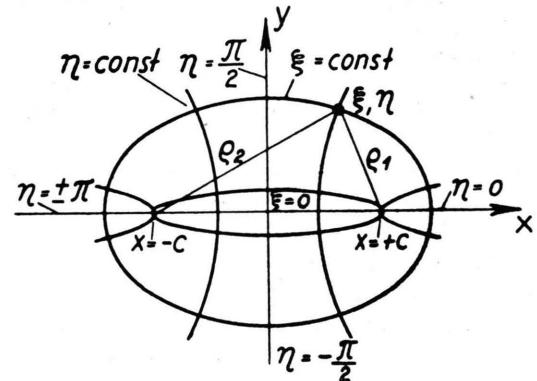


Abb. 1. Das zur Behandlung aufgespaltener Versetzungen verwendete Koordinatensystem  $\xi, \eta, z$  (elliptische Zylinderkoordinaten — die  $z$ -Achse ist senkrecht zur Zeichenebene). Die beiden Halbversetzungen befinden sich an den Stellen

Zur Berechnung der integralen Dilatation und später der Kleinwinkelstreuung führen wir elliptische Zylinderkoordinaten  $z, \xi, \eta$  ein, wobei wir die Zylinderachse ( $z$ -Achse) parallel zu den Versetzungslinien legen und, falls nicht anders gesagt, die Bezeichnungen von MEIXNER und SCHÄFFKE<sup>17</sup> verwenden.

Es ist

$$\left. \begin{array}{l} x = c \operatorname{\mathfrak{C}\mathfrak{o}\mathfrak{f}} \xi \cos \eta, \\ y = c \operatorname{\mathfrak{S}\mathfrak{i}\mathfrak{n}} \xi \sin \eta, \\ z = z, \end{array} \right\} \begin{array}{l} 0 \leqq \xi \leqq \infty, \\ -\pi < \eta \leqq +\pi, \end{array}$$

$$\varrho_1 \varrho_2 = c^2 (\operatorname{\mathfrak{C}\mathfrak{o}\mathfrak{f}}^2 \xi - \cos^2 \eta), \quad (3)$$

$$dy dz = c^2 (\operatorname{\mathfrak{C}\mathfrak{o}\mathfrak{f}}^2 \xi - \cos^2 \eta) d\xi d\eta dz,$$

$$\varrho^2 = x^2 + y^2 = c^2 (\operatorname{\mathfrak{C}\mathfrak{o}\mathfrak{f}}^2 \xi \cos^2 \eta + \operatorname{\mathfrak{S}\mathfrak{i}\mathfrak{n}}^2 \xi \sin^2 \eta),$$

$$\varrho \approx \frac{1}{2} c e^{\xi} \quad (\xi \gg 1).$$

Zur Ermittlung der Volumänderung  $\Delta V$  pro Längeneinheit der Versetzungslinie hat man einen äußeren Abschneideradius  $R (\approx \frac{1}{2} c e^{\xi_\infty})$  einzuführen, der von der Größenordnung des mittleren Ver-

<sup>15</sup> D. L. DEXTER, Phys. Rev. **90**, 1007 [1953].

<sup>16</sup> A. SEEGER u. H. STEHLE, Z. Phys., im Druck.

<sup>17</sup> J. MEIXNER u. F. W. SCHÄFFKE, MATHIEUSCHE FUNKTIONEN UND SPHÄROIDFUNKTIONEN, SPRINGER-VERLAG, BERLIN-GÖTTINGEN-HEIDELBERG 1954.

setzungsabstandes ist. Aus Gl. (2) ergibt sich dann

$$\Delta V = \frac{b^2 K}{4 \pi^2} \int \int \frac{1}{\varrho_1 \varrho_2} dx dy = \frac{b^2 K}{4 \pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} \int_0^{\xi_\infty} d\xi d\eta \quad (4)$$

$$= \frac{b^2 K}{2 \pi} \log \frac{2 R}{c},$$

während die entsprechende Größe nach Gl. (1)

$$\Delta V = \frac{K b^2}{2 \pi} \left( \log \frac{R}{\varrho_0} + \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

ist. Da man Gl. (4) auch in der Form

$$\Delta V = \frac{K b^2}{2 \pi} \left( \log \frac{R}{\varrho_0} + \frac{1}{2} - \log \frac{c}{c_0} \right) \quad (4a)$$

$$c_0 = 2 \varrho_0 / V \approx \frac{2}{5} b \quad \left. \right\}$$

schreiben kann, stimmen Gl. (5) und (4) dann überein, wenn der Abstand zwischen den Halbversetzungen

$$2 c = 2 c_0 \approx 4 b/5 \quad (6)$$

ist. Diesen Abstand hat man etwa als Abschneideabstand einzuführen, wenn man den Ansatz Gl. (2) zur Behandlung nicht oder nur wenig aufgespalterer Versetzungen verwenden will. Da Gl. (2) im Gegensatz zu Gl. (1) durch einen einheitlichen mathematischen Ausdruck gegeben ist, kann ein solches Vorgehen manchmal Vorteile bieten, wie wir in Ziff. 3 sehen werden. Für  $c \geq c_0$  nimmt die Volumänderung mit wachsender Aufspaltung ab, und zwar etwa in der an anderer Stelle<sup>2</sup> diskutierten Weise, so daß Gl. (4) in der Tat eine befriedigende Beschreibung der Verhältnisse gibt. Wir schließen daraus, daß auch Gl. (2) eine für die Untersuchung der Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen zweckmäßige Darstellung der Dilatation in der Umgebung einer aufgespaltenen Schraubenversetzung darstellt und werden davon in der folgenden Ziffer ausführlich Gebrauch machen.

### 3. Die Kleinwinkelstreuung von Röntgenstrahlen durch aufgespaltene Versetzungen

Die Untersuchung von verformten Einkristallen (oder auch Vielkristallen) mit Hilfe der Kleinwinkelstreuung verspricht, wesentlich detailliertere Informationen über die Versetzungsichte und Versetzungsanordnung zu geben als sie bisher zur Verfügung stehen. Man kann z. B. verschiedene Volumteile des Kristalls durchstrahlen und etwa die Verhältnisse innerhalb und außerhalb von Knickbändern

und Bändern zweiter Gleitung untersuchen. Dabei kann man jeweils nicht nur einen Integralwert für die Versetzungsichte erhalten, sondern (innerhalb gewisser Grenzen der unabhängigen Variablen) Funktionen mehrerer Veränderlicher, nämlich der Durchstrahlungsrichtung (charakterisiert durch 2 Winkel), des Streuwinkels  $2\vartheta$  und des Azimuts um die Durchstrahlungsrichtung. Man kann erwarten, auf diese Weise mit Hilfe einer ausgebauten Theorie über die Kleinwinkelstreuung verschiedener Versetzungsanordnungen detaillierte Aufschlüsse über die Versetzungsverteilung im verformten Material zu bekommen. Da ein rein deduktiver Aufbau der Theorie, die z. B. den Krümmungen des Versetzungsverlaufs und den Änderungen des Versetzungscharakters Rechnung tragen muß, zu schwierig wäre, wird die weitere Entwicklung der Theorie am besten in enger Fühlungnahme mit den experimentellen Ergebnissen erfolgen. Gewissermaßen als Grundbaustein behandeln wir die Streuung durch eine einzelne isolierte Versetzungslinie. Der Tatsache, daß eine Versetzungslinie wegen ihrer Flexibilität nur über eine bestimmte Länge hinweg kohärent streut, tragen wir dadurch Rechnung, daß wir eine Versetzung wie eine isolierte Partikel der Länge  $L$  behandeln. Dies stellt natürlich nur eine Behelfslösung des Anordnungsproblems dar; auf jeden Fall hat man sich das Ergebnis über einen weiten Bereich von möglichen  $L$ -Werten, mit entsprechenden Gewichten versehen, gemittelt zu denken.

Bei den folgenden Rechnungen gehen wir von dem Dilatationsverlauf gemäß Gl. (2) aus. Auch dies stellt natürlich nur eine erste Näherung dar, die durch eine genauere Behandlung der Wirkungen von Stufenversetzungen verfeinert werden muß. Eine derartige Verfeinerung dürfte sich jedoch verhältnismäßig gut an die aus Gl. (2) folgenden Resultate anschließen lassen, die wohl die wesentlichen Effekte (vor allem auch diejenigen der Aufspaltung in Halbversetzungen) wiederzugeben vermögen.

Unter den ebengenannten Bedingungen ist die Streuamplitude in dem experimentell interessierenden Bereich von Streuwinkeln gegeben durch

$$A(g) = \frac{D}{M} F(g) A_e(g) \int \int \int_{\text{Partikel}} A(r) e^{-i g r} d\tau_r, \quad (7)$$

wobei  $A_e(g)$  die z. B. bei GUINIER und FOURNET<sup>18</sup> angegebene Streuamplitude für ein einzelnes Elek-

<sup>18</sup> A. GUINIER u. G. FOURNET, Small-Angle Scattering of x-rays, John Wiley & Sons, New York 1955, insbes. S. 6.

tron,  $M$  und  $F(g)$  Atomgewicht und Atomformamplitude des betreffenden Elements und  $D$  die Kristalldichte bedeuten. Der Vektor  $g$  ist als Differenz zwischen den Wellenvektoren  $\mathbf{k}'$  der gestreuten und  $\mathbf{k}$  der einfallenden Welle, also durch

$$g = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (8)$$

definiert. Bezeichnet  $\lambda$  die Wellenlänge der verwendeten RÖNTGEN-Strahlung und  $2\vartheta$  den Streuwinkel (vgl. Abb. 2), so ist

$$g = |g| = \frac{4\pi\vartheta}{\lambda} = \sqrt{g_z^2 + g_\varrho^2}. \quad (9)$$

$g_z$  ist die Komponente von  $g$  parallel zur  $z$ -Richtung,  $g_\varrho$  die Länge der Projektion von  $g$  auf die  $x-y$ - (bzw.  $\xi-\eta$ -)Ebene. Diese Projektion möge mit der positiven Richtung der  $x$ -Achse den Winkel  $\alpha$  einschließen. Mit diesen Bezeichnungen gilt

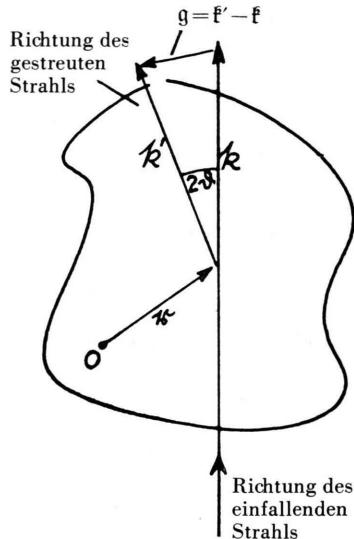


Abb. 2. Der Zusammenhang zwischen den Wellenvektoren  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}'$  und  $\mathbf{g}$  und dem Streuwinkel  $2\vartheta$ .

$$\exp\{-i\mathbf{g}\mathbf{r}\} = \exp\{-i g_z z\} \cdot \exp\{-i(g_\varrho x \cos \alpha + g_\varrho y \sin \alpha)\}. \quad (10)$$

Den zweiten Faktor auf der rechten Seite von Gl. (10) kann man folgendermaßen schreiben<sup>17</sup>:

$$\begin{aligned} \exp\{-i g_\varrho (x \cos \alpha + y \sin \alpha)\} &= \exp\{-2i h w\} \\ &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^m \text{ce}_m(\alpha; h^2) M_m^{(1)}(\xi; h) \text{ce}_m(\eta; h^2) \\ &\quad + 2 \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^m \text{se}_m(\alpha; h^2) M_{-m}^{(1)}(\xi; h) \text{se}_m(\eta; h^2). \end{aligned} \quad (11)$$

Hier bedeuten

$$h = \frac{1}{2} g_\varrho c,$$

$$w = \text{Cof} \xi \cos \eta \cos \alpha + \text{Sinf} \xi \sin \eta \sin \alpha; \quad (12)$$

$\text{ce}_m$ ,  $\text{se}_m$  und  $M_m^{(1)}$  sind bei MEIXNER und SCHÄFFKE<sup>17</sup> im einzelnen definierten MATHIEUSCHEN Funktionen ganzer Ordnung.

Die Integration über  $z$  (von  $z = -L/2$  bis  $z = +L/2$ ) in Gl. (7) lässt sich leicht ausführen; wir fassen das Resultat mit den übrigen Faktoren in Gl. (7) zu einem Faktor

$$C(g) = A_e(g) \frac{D}{M} F(g) \frac{2 \sin(g_z \cdot L/2)}{g_z} \quad (13)$$

zusammen. Es gilt dann

$$\begin{aligned} A(g) &= C(g) \frac{K b^2}{2 \pi^2} \int_{\eta = -\pi}^{+\pi} \int_{\xi = 0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^m \{ \text{ce}_m(\alpha; h^2) M_m^{(1)}(\xi; h) \text{ce}_m(\eta; h^2) \\ &\quad + \text{se}_m(\alpha; h^2) M_{-m}^{(1)}(\xi; h) \text{se}_m(\eta; h^2) \} d\xi d\eta. \end{aligned} \quad (14)$$

Bei der Integration über  $\eta$  fallen viele Glieder aus Symmetriegründen fort; es bleibt lediglich

$$A(g) = C(g) \frac{K b^2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \text{ce}_{2n}(\alpha; h^2) A_0^{2n}(h^2) \int_0^{\infty} M_{2n}^{(1)}(\xi; h) d\xi. \quad (15)$$

Die in Gl. (15) auftretenden Funktionen sind folgendermaßen definiert<sup>17</sup>:

$$\begin{aligned} \text{ce}_{2n}(\eta; h^2) &= \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r}^{2n}(h^2) \cos 2r\eta, \\ M_{2n}^{(1)}(\xi; h) &= \frac{1}{2 \text{ce}_{2n}(0; h^2)} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{n-r} A_{2r}^{2n}(h^2) J_{2r}(2h \xi) \quad (n=0, 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (16)$$

$J_m(z)$  bedeutet dabei wie üblich die BESSELSCHE Funktion. Die Integration über  $\xi$  wird am einfachsten gliedweise mit nachfolgender Summation ausgeführt; es ergibt sich auf diese Weise ( $N_m(z) =$  NEUMANNSCHE Funktion  $m$ -ter Ordnung)

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} M_{2n}^{(1)}(\xi; h) d\xi &= -\frac{\pi}{2 \text{ce}_{2n}(0; h^2)} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^{n-r} A_{2r}^{2n}(h^2) J_r(h) N_r(h) \\ &\equiv -\frac{\pi}{2 \text{ce}_{2n}(0; h^2)} A_0^0(h^2) M_{2n}^{(2)}(0; h^2) \quad (n=0, 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (17)$$

Unser Gesamtresultat lautet damit

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(g) &= C(g) \frac{K b^2}{2} \mathbf{A}_1(g), \\ \mathbf{A}_1(g) &= -\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\text{ce}_{2n}(g; h^2)}{\text{ce}_{2n}(0; h^2)} [A_0^{2n}(h^2)]^2 M_{2n}^{(2)}(0; h^2). \end{aligned} \quad (18)$$

Gl. (18) besitzt vor der an anderer Stelle<sup>8</sup> gegebenen Behandlung unaufgespaltener Schraubenversetzungen den Vorzug, daß alle auftretenden Funktionen (bzw. bestimmte Hilfsfunktionen) tabelliert sind, während die bei der anderen Rechenweise auftretende STRUVESCHE Funktion  $S_{-1,0}(z)$  und ihre Ableitung numerisch ziemlich schwierig zu handhaben sind. Aus diesem Grunde kann, wie oben angedeutet, die Verwendung von Gl. (18) sogar für nicht aufgespaltene Versetzungen Vorteile bieten. Die beiden Lösungen unterscheiden sich dann gewissermaßen nur in der Art der Divergenzverhütenden Abschneidung für kleines  $g$ , die natürlich ohnehin nicht genau festzulegen ist.

Die zur Auswertung erforderlichen numerischen Daten sind in „Tables Relating to MATHIEU Functions“<sup>19</sup> zusammengestellt, und zwar gerade für den physikalisch interessierenden Bereich  $0 \leq g_c c \leq 10$  ( $c$  überschreitet nur in Ausnahmefällen den Wert 7 b).

Die dabei verwendeten Bezeichnungen lauten

$$s = 4h^2 = (g_c c)^2,$$

$$\text{Se}_{2n}(s, \alpha) \equiv \frac{\text{ce}_{2n}(\alpha; h^2)}{\text{ce}_{2n}(0; h^2)} = \sum_{k=0}^{\infty} \text{De}_{2k}^{2n}(s) \cos 2k\alpha,$$

<sup>19</sup> Tables Relating to MATHIEU Functions, National Bureau of Standards, Columbia University Press, New York 1951.

$$\frac{f_{e,2n}}{g_{e,2n}} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} M_{2n}^{(2)}(0; h^2), \quad (19)$$

$$\text{De}_k^r(s) = \frac{A_k^r(h^2)}{A},$$

wo  $A = A(r; s)$  eine ebenfalls tabellierte Funktion ist.

Damit erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mathbf{A}_1(g) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{f_{e,2n}}{g_{e,2n}} \text{Se}_{2n}(s, \alpha) \\ &\quad \cdot [A(2n; s) \text{De}_0^{(2n)}(s)]^2. \end{aligned} \quad (20)$$

Die rechte Seite von Gl. (20) wurde für verschiedene Einfallswinkel ( $\alpha = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ ) numerisch berechnet (es wurden jeweils nur wenige Glieder der Reihenentwicklung benötigt) und in Abb. 3 als Funktion von  $s = g_c \cdot c$  aufgetragen. Für  $g_c \rightarrow 0$  divergiert Gl. (20). Dies röhrt in bekannter Weise<sup>8</sup> davon her, daß wir den Abschneideradius  $\xi_\infty$  als unendlich groß angenommen haben. Für kleine  $g_c$  ist dies nicht mehr erlaubt. Die auf den Streuwinkel Null extrapolierte Streuamplitude ergibt sich vielmehr gemäß

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} \frac{\mathbf{A}(g)}{C(g)} = \Delta V, \quad (21)$$

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} \mathbf{A}_1(g) = \frac{1}{\pi} \log \frac{2R}{c}. \quad (22)$$

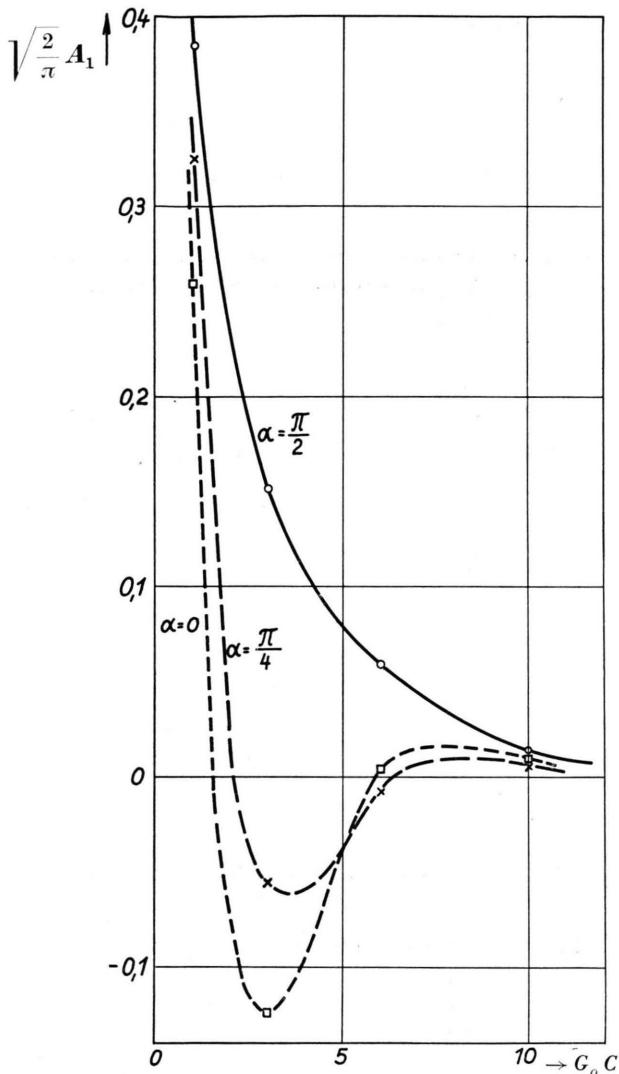


Abb. 3. Normierte Streuamplitude  $\sqrt{2/\pi} A_1$ , gemäß Gl.(20), als Funktion des Produktes des halben Versetzungsbstandes  $c$  und der senkrecht zur Versetzungslinie liegenden Komponente  $g_\parallel$  des Vektors  $g = \mathbf{f}' - \mathbf{f}$ . Die mit  $\alpha=0$ ,  $\alpha=\pi/4$  und  $\alpha=\pi/2$  bezeichneten Kurven gehören zu verschiedenen Einfallswinkeln gegenüber dem von den Halbversetzungen aufgespannten Stapelfehler.

Der Grenzwert Gl. (22) liegt in praktischen Fällen in der Größenordnung 1 bis 2.

#### 4. Schlußbemerkungen

Wie zu erwarten war, hängt die Streuamplitude (bzw. die daraus durch Quadrieren zu bildende

Streuintensität) sehr stark von  $\alpha$  ab, also von dem Winkel, den die Differenz  $g$  der Wellenvektoren der gestreuten und der einfallenden Welle mit der Ebene des zwischen den Halbversetzungen aufgespannten Stapelfehlers bildet. Liegt der Differenzvektor in der Stapelfehlerebene, so erscheint die aufgespaltene Versetzung als räumlich sehr ausgedehnt; liegt der Differenzvektor senkrecht zur Stapelfehlerebene, so erscheint sie als verhältnismäßig schmal.

Bei dieser Erörterung haben wir angenommen, daß einfallender und gestreuter Strahl in einer Ebene senkrecht zur Versetzungslinie liegen. Im anderen möglichen Extremfall, in dem die Versetzungslinie parallel zu dem oben erwähnten Vektor ist, erscheint sie als sehr ausgedehnte Partikel, deren Länge durch die in Ziff. 3 eingeführte Größe  $L$  bestimmt wird.  $L$  stellt ein Maß für die Geradlinigkeit des Versetzungslinienverlaufs dar, wobei man, wie schon erwähnt, immer mit einem Spektrum tatsächlich auftretender  $L$ -Werte zu rechnen hat. Einen Mittelwert von  $L$  kann man experimentell ermitteln, wenn die Streuintensität für „große“  $\vartheta$  proportional zu  $\vartheta^{-4}$  ist.

Man sieht, daß sich, je nach der Orientierung von  $g$  gegenüber der Versetzungslinie, eine ganz verschiedene scheinbare Ausdehnung der Versetzungslinie ergeben kann, die zwischen einigen Atomabständen und einigen hundert Atomabständen ( $\approx L$ ) liegen kann. Auf diese Weise versteht man, daß BLIN und GUINIER<sup>10</sup> unter verschiedenen Versuchsbedingungen ganz verschiedene „Trägheitsradien“ der für die Kleinwinkelstreuung verantwortlichen Störungen des Kristallgitters erhalten haben.

Bei sehr kleinen Streuwinkeln werden die Verhältnisse dadurch komplizierter, daß die Wechselwirkungen zwischen benachbarten Versetzungen, die natürlich durch den Abschneideradius  $R$  nur ungenügend erfaßt werden, eine Rolle spielen<sup>20</sup>. Wie schon erwähnt, erfolgt die Fortführung der Theorie in dieser Richtung wohl am besten im Zusammenhang mit vollständigeren experimentellen Ergebnissen, als sie bis jetzt vorliegen.

Der Verfasser wünscht Herrn Prof. U. DEHLINGER für sein reges Interesse an der vorliegenden Arbeit, Herrn Dr. V. GEROLD und Herrn Dipl.-Phys. H. STEHLE für wertvolle Diskussionen zu danken.

<sup>20</sup> Die Messungen von S. HAYES u. R. SMOLUCHOWSKI (Appl. Sci. Res. B 4, 10 [1954]) im Bereich von  $\vartheta=0,2^\circ$  bis  $\vartheta=0,3^\circ$  zeigen, daß die Verhältnisse bei kleinen Streuwinkeln (auch hinsichtlich des Verhaltens beim Anlassen) sehr kompliziert sind und daß die Intensität als Funktion von  $\vartheta$  nicht einmal näherungsweise durch die von BLIN u. GUINIER<sup>9</sup> benutzte Formel  $I(\vartheta)=I(0) \exp\{-g^2 R_0^2/3\}$  mit dem „Streumassenradius“  $R_0$  dargestellt wird.

<sup>20</sup> Die Messungen von S. HAYES u. R. SMOLUCHOWSKI (Appl. Sci. Res. B 4, 10 [1954]) im Bereich von  $\vartheta=0,2^\circ$  bis  $\vartheta=0,3^\circ$  zeigen, daß die Verhältnisse bei kleinen Streuwinkeln (auch hinsichtlich des Verhaltens beim Anlassen)