

Die Formulierung der Elektronenbeugung mittels einer Streumatrix und ihre praktische Verwendbarkeit

Von H. NIEHRS

Aus dem Institut für Elektronenmikroskopie am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin-Dahlem

(Z. Naturforsch. **14 a**, 504—511 [1959]; eingegangen am 23. Februar 1959)

Für die Elektronenbeugung an durchstrahlten Kristallen (LAUE-Fall) und ihre Begleitprozesse (Reflexionen) können aus der dynamischen Beugungstheorie Matrixoperatoren hergeleitet werden. Sie beschreiben die Wandlung der Amplitudenverteilung nach Strahlrichtungen und erlauben die explizite Darstellung der Intensitäten austretender und reflektierter Strahlen auch im Mehrstrahl-Fall, ohne daß eine Bestimmung von Wellenfeldern im Kristall (Lösung eines Eigenwertproblems) erforderlich wird. Dem üblichen Eigenwertverfahren ist dieses Streumatrixverfahren fast stets dadurch überlegen, daß der Rechenaufwand bei der Anwendung erheblich geringer ist.

Zur rechnerischen Bestimmung der Strahlintensitäten im Elektronenbeugungsbild einer durchstrahlten Kristallplatte hat STURKEY¹ eine Streumatrix angegeben, mit deren Hilfe auch die Wechselwirkungen der abgelenkten Strahlen untereinander erfaßt werden sollen, die schon bei nicht sehr kleinen Kristalldicken bedeutend sind. Dem (im leider sehr knappen Vortragsbericht mitgeteilten) Resultat muß man jedoch entnehmen, daß ihm Voraussetzungen zugrunde liegen, die seine Gültigkeit zumindest unangenehm einschränken. Da nämlich die angegebene Matrix \mathfrak{H} eine HERMITESCHE ist, folgt für die Partialwellenamplituden $\varphi_h(t)$ nach der Kristalldicke t die Beziehung

$$\sum_h |\varphi_h(t)|^2 = \sum_h |\varphi_h(0)|^2;$$

dagegen fordert die Bilanz zwischen einfallendem und austretendem Strahlstrom in Wirklichkeit

$$\sum_h \cos \gamma_h \cdot |\varphi_h(t)|^2 = \sum_h \cos \gamma_h \cdot |\varphi_h(0)|^2,$$

wenn γ_h den Winkel zwischen der Normale zur Kristallplatte und der Richtung des Beugungsstrahls zum Indextripel h bedeutet. In der angegebenen Streumatrix sind also offenbar die Richtungsunterschiede der Strahlen in irgendeiner Weise vernachlässigt. Das ist bedenklich, wenn gebeugten Strahlen dadurch falsche Anregungsfelder für weitere Beugungen zugeordnet werden. Formal und für die Anwendung nachteilig erscheint auch, daß die auf der Basis der geometrischen Beugungstheorie aufgestellten Matrixelemente von \mathfrak{H} selbst noch von der Kristalldicke abhängig sind.

¹ L. STURKEY, Acta Cryst. **10**, 858 [1957].

Im folgenden soll die Streumatrix für die durchstrahlte Kristallplatte auf der Basis der dynamischen Beugungstheorie und unter den dort für den LAUE-Fall üblichen Annahmen und Näherungen hergeleitet werden. Die ebenfalls durchführbare strenge Matrixformulierung, die auch Reflexionen voll berücksichtigt, ist für die Anwendung kaum von Interesse und soll hier nicht entwickelt werden. Aber auch deren allgemeineres Resultat ist so einfach und durchsichtig, daß es noch am Schluß des Aufsatzes erörtert werden soll.

I. Experimentelle Voraussetzungen und theoretisches Ziel

Denken wir uns eine planparallele Kristallplatte, auf die ein primärer Elektronenstrahl scharf bestimmten Impulses (ebene Elektronenwelle) auffällt. Dann können auf der Rückseite der Kristallplatte infolge Beugung am Atomgitter abzählbar viele Strahlen austreten, deren Richtungen vollkommen bestimmt sind durch die Primärrichtung und die geometrische Struktur des Gitters. Die Tangentialkomponenten ihrer Wellenvektoren (bezogen auf die Kristallgrenzebenen) sind nämlich

$$k \sin \gamma_h = k_t + b_{ht}, \quad (1)$$

wenn $k_t = k \sin \gamma_0$ diejenige des primären Wellenvektors ist, und b_{ht} die Tangentialkomponenten der reziproken Gittervektoren, h die Indextripel im reziproken Gitter (d. h. die Beugungsordnungen) sind. $k = 1/\lambda$ ist die einheitliche Wellenzahl aller Strahlen im Vakuum. An diesen möglichen Richtungen ändert sich nichts, wenn wir auch zulassen, daß primär ebenfalls alle diese Strahlrichtungen in einer Vielfalt



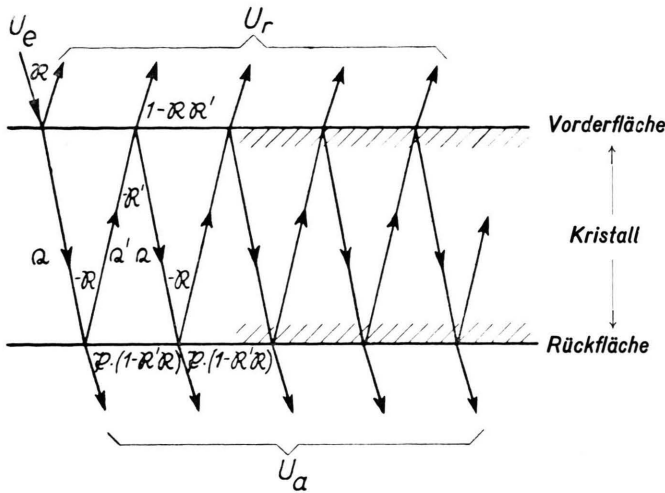


Abb. 1. Wandlung der Amplitudenverteilung nach Strahlrichtungen durch Elektronenbeugung im Kristall für den Fall, daß die Wellenvektoren der einfallenden Strahlen eine Gesamtheit gemäß Gl. (1) bilden.

von Primärstrahlen gleicher Wellenzahl (d. h. Energie) vorhanden sind (Abb. 1). Die Wirkung der beugenden Kristallplatte ist dann, daß sie die Amplituden der Strahlen hinter der Platte auf die einzelnen Richtungen anders als vor der Platte verteilt. Richtungen, die vor der Platte ohne Intensität sind, können hinter der Platte mit Intensität auftreten (oder auch umgekehrt). Die Platte transformiert also die Verteilung der Strahlintensität nach Richtungen.

Da jeder Strahl seiner Richtung nach gemäß (1) durch ein Indextripel h charakterisiert ist, kann man die Amplituden der eintretenden und der austretenden Strahlen je zu einer einspaltigen Matrix zusammenfassen, deren Elemente durch die Indextripel h numeriert werden [$o = (000)$]:

$$\mathbf{U}_e = \begin{pmatrix} U_{eo} \\ \vdots \\ U_{eh} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}_a = \begin{pmatrix} U_{ao} \\ \vdots \\ U_{ah} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Die Formulierung der Elektronenbeugung mittels einer Streumatrix bedeutet nun, daß man die Amplituden U_{ah} der austretenden Strahlen *explizit* als (lineare) Funktion der Amplituden U_{eh} der eintretenden Strahlen darstellt. Das kann in der Schreibweise geschehen

$$\mathbf{U}_a = \mathcal{M} \cdot \mathbf{U}_e, \quad (3)$$

worin \mathcal{M} eine quadratische Matrix, die „Streumatrix“, ist, deren Elemente M_{gh} vorgegebene Größen (Funktionen der Strahlrichtungen, der Wellenzahl k und der Kristalleigenschaften) sind. Die li-

neare Transformation der Amplitudenverteilung \mathbf{U}_e vor der Platte in eine neue Amplitudenverteilung \mathbf{U}_a hinter der Platte wird hier durch die Multiplikation mit der Streumatrix \mathcal{M} ausgedrückt. Bevor wir an ihre Herleitung gehen, mögen die bisher übliche Berechnungsmethode für die austretenden Strahlen und ihre Schwierigkeiten beleuchtet werden.

II. Das Vorgehen der dynamischen Beugungstheorie

Die übliche Berechnung nach der dynamischen Beugungstheorie² geschieht gemäß einer Vorschrift, die folgende Rechnungsschritte umfaßt: Mit den vorgegebenen Größen $G_h = \cos \gamma_h$,

b_{hz} = Vertikalkomponente des reziproken Gittervektors \mathbf{b}_h ,

Φ_h = Strukturfaktor (FOURIER-Koeffizient des inneren Kristallpotentials) zum Indextripel h

wird ein lineares Gleichungssystem

$$2\beta k G_h (K_{jz} + b_{hz} - k G_h) u_{hj} = \sum_g \Phi_{h-g} u_{gj} \quad (4)$$

für alle h aufgestellt, das eine unmittelbare Folge der SCHRÖDINGER-Gleichung für das periodische Potentialfeld im Kristall und ihres Lösungsansatzes unter gewissen geometrischen Randbedingungen ist. Die Bedeutung der Unbekannten K_{jz} , u_{hj} ist folgende: Im Kristall treten als Fortsetzung der Primärstrahlen Wellenfelder, numeriert mit j , auf. Ihre Partialwellen haben die Amplituden u_{hj} , und $K_{jz} + b_{hz}$

² s. z. B. M. v. LAUE, Materiewellen und ihre Interferenzen, Akadem. Verlagsges. Geest & Portig KG, Leipzig 1948.

sind die Vertikalkomponenten ihrer Wellenvektoren. β hängt nur von der Elektronenenergie ab und ist im Bereich nicht-relativistischer Energie die universelle Konstante 150 Volt \AA^2 . Da das Gleichungssystem (4) homogen in den u_{hj} ist, gibt es Lösungen, bei denen nicht alle $u_{hj}=0$ sind, nur für bestimmte Werte von K_{jz} . Die K_{jz} , die die einzelnen Wellenfelder charakterisieren, ergeben sich aus der Bedingung, daß die Determinante aus den Koeffizienten des Systems (4) gleich 0 sein muß. Diese Bedingung erweist sich als eine algebraische Gleichung, deren Lösungen die verschiedenen Werte von K_{jz} sind. Die Auflösung dieser „Säkulargleichung“ des Systems (4) ist *Schritt Nr. 1* des Verfahrens.

Von den bekannten Werten hängt es ab, welche und wieviele Indextripel h als wesentlich in Rechnung gestellt werden müssen, um die von der Näherungsformel (4) gewährleistete optimale Näherung des Endresultats zu erzielen. Sind N Indextripel h [einschl. (000)] als wesentlich erkannt, so umfaßt (4) für jeden Index j N Gleichungen, die N unbekannte u_{hj} miteinander verknüpfen; die Säkulargleichung ist dann eine algebraische Gleichung N -ten Grades. Sind ihre N Lösungen K_{jz} bestimmt, so besteht *Rechenschritt Nr. 2* darin, die zugehörigen Amplitudenverhältnisse $u_{hj} : u_{gj}$ aus (4) zu berechnen. In Schritt Nr. 1 und 2, der Lösung eines „Eigenwertproblems“, werden dadurch die *Struktureigenschaften* der im Kristall *möglichen Wellenfelder* j bestimmt.

Ihre wirkliche Stärke, d. h. die Partialamplituden u_{hj} selbst, liefern erst im *Rechenschritt Nr. 3* die Randbedingungen an der Strahleintrittsfläche

$$\sum_j u_{hj} = U_{eh} \quad (5)$$

für alle h ; sie verknüpfen die Amplituden aller Wellen mit gleicher Tangentialkomponente $k \sin \gamma_h$. Schließlich geben im *Rechenschritt Nr. 4* entsprechende Randbedingungen an der Strahlaustrittsfläche

$$\sum_j u_{hj} \cdot \exp[-2\pi i D (K_{jz} + b_{hz})] = U_{ah} \cdot \exp[-2\pi i D k G_h] \quad (6)$$

für alle h die Amplituden U_{ah} der austretenden Wellen. D ist die Kristalldicke, und jeder der hier auftretenden Exponentialfaktoren gibt die der Partialwelle eigentümliche Phasenänderung gegenüber der Strahleintrittsfläche wieder.

In den Näherungen (4) bis (6) sind die bei Durchstrahlung sehr schwachen Reflexionen an den Grenzflächen vernachlässigt.

Das ganze Rechnungsverfahren ist im Mehrstrahlfall, $N > 2$ überaus kompliziert, und zwar aus zwei Gründen. Erstens gibt es keine explizite Darstellung der Lösungen einer algebraischen Gleichung N -ten Grades, wie sie die Säkulargleichung (Rechenschritt Nr. 1) darstellt. Infolgedessen erscheint auch keine explizite Darstellung der U_{ah} möglich. Zweitens bestehen fast sämtliche Rechenvorgänge in jedem der Schritte Nr. 1 bis 3 in der Ausrechnung von Determinanten N -ter Ordnung (je N Zeilen und Spalten). Die Ausrechnung *einer* solchen Determinante erfordert aber (bei größerem N) die Bildung von $N(N+1)/2$ Produktsummen, nämlich jeweils die Bildung von N Produktsummen zur Reduktion von der N -ten zur $(N-1)$ -ten Ordnung. Im Schritt Nr. 1 hat dies für die Bestimmung eines jeden der N Werte K_{jz} bei jedem Näherungsschritt zu geschehen. Die Anzahl der notwendigen Näherungsschritte hängt zwar von der geschickten Wahl der Ausgangswerte bzw. der Erfahrung des Rechners ab. In den wenigen bisher behandelten Fällen mit größerem N hätte sie aber praktisch nicht unter $N-1$ gesenkt werden können. Die Lösungen K_{jz} der Säkulargleichung müssen nämlich mit *hoher* Genauigkeit berechnet werden, wenn man die u_{hj} in den weiteren Rechenschritten mit einigermaßen *befriedigender* Genauigkeit erhalten will. Insgesamt kommt man also nicht umhin, im Rechenschritt Nr. 1 rund $N^4/2$ Produktsummen auszuwerten. Etwa den gleichen Rechenaufwand erfordert Schritt Nr. 2. Hier sind nämlich $N(N-1)$ Amplitudenverhältnisse $u_{hj} : u_{gj}$ als Quotienten von Determinanten auszurechnen. Zur Bestimmung der Struktureigenschaften der Wellenfelder sind daher rund N^4 Produktsummen zu bilden.

Demgegenüber spielt der Rechenaufwand in den Schritten Nr. 3 und 4 keine Rolle mehr, wenn auch die N Summierungen von je N verschiedenen Exponentialgliedern nach (6) nicht ganz angenehm sind. (Schritt Nr. 3 kann nach einem von NIEHRS und WAGNER angegebenen Verfahren praktisch umgangen werden³.)

III. Herleitung der Streumatrix

Die Bestimmung der Wellenfelder im Kristall, d. h. die Lösung des Eigenwertproblems, kann aber vollständig umgangen werden durch die Entwicklung der Streumatrix. (Freilich haben wir der Mathematik dafür einen Preis an anderer Stelle zu zahlen. Wir

³ H. NIEHRS u. E. H. WAGNER, Z. Phys. 143, 285 [1955].

werden uns später zu fragen haben, ob und insbesondere bis zu welchen Kristalldicken dieser Preis angemessen ist.) Um die Streumatrix zu entwickeln, schreiben wir die Gleichungssysteme (4) bis (6) nacheinander in Form je einer Matrixgleichung. Aus (4) wird

$$2\beta k \mathbb{G} \cdot (\mathbb{U} \cdot \mathbb{R} + \mathbb{B} \cdot \mathbb{U} - k \mathbb{G} \cdot \mathbb{U}) = \mathbb{B} \cdot \mathbb{U}. \quad (7)$$

\mathbb{U} ist die quadratische Matrix der Elemente u_{hj} (Zeilenindex h , Spaltenindex j). \mathbb{B} ist die quadratische Matrix der Elemente $V_{gh} = \Phi_{g-h}$ (Zeilen- und Spaltenindizes sind Indextripel h bzw. g). \mathbb{R} , \mathbb{B} und \mathbb{G} sind „Diagonalmatrizen“ bzw. mit den Elementen

$$K_{jj} = K_{jz}, \quad B_{hh} = b_{hz}, \quad G_{hh} = \cos \gamma_h.$$

Bei den Matrixmultiplikationen in (7) wird \mathbb{U} mit \mathbb{R} „spaltenweise“ multipliziert, deshalb tritt \mathbb{R} rechts neben \mathbb{U} . Mit den übrigen Matrizen wird \mathbb{U} „zeilenweise“ multipliziert, deshalb treten sie links neben \mathbb{U} . Auf der linken Seite treten nur Produkte auf, in denen ein Faktor jeweils eine Diagonalmatrix ist. Bei der Auswertung der Elemente reduziert sich daher jedes Element eines Produkts auf das eine, in (4) vorhandene Glied.

Nach der Matrizenalgebra können wir (7) umformen in

$$\mathbb{U} \cdot \mathbb{R} = \left(\frac{1}{2\beta k} \mathbb{G}^{-1} \cdot \mathbb{B} + k \mathbb{G} - \mathbb{B} \right) \cdot \mathbb{U} \quad (8)$$

oder auch

$$\mathbb{U} \cdot \mathbb{R} \cdot \mathbb{U}^{-1} = \mathbb{S} = \frac{1}{2\beta k} \mathbb{G}^{-1} \mathbb{B} + k \mathbb{G} - \mathbb{B}. \quad (9)$$

Diese Gleichung bedeutet, daß das Lösungsproblem in der Matrixsprache darin besteht, eine Transformation zu finden, durch deren Anwendung die vorgegebene Matrix \mathbb{S} in eine Diagonalmatrix \mathbb{R} übergeht.

Die Randbedingungen (5) an der Strahleintrittsfläche können geschrieben werden

$$\mathbb{U} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{U}_e. \quad (10)$$

Darin bedeutet \mathbf{E} eine einspaltige Matrix (wie \mathbf{U}_e und \mathbf{U}_a), deren sämtliche Elemente (mit j zu indizieren) gleich 1 sind. Die Randbedingungen (6) an der Strahlaustrittsfläche werden entsprechend zusammengefaßt zu

$$\exp(-2\pi i D \mathbb{B}) \mathbb{U} \exp(-2\pi i D \mathbb{R}) \cdot \mathbf{E} = \exp(-2\pi i D k \mathbb{G}) \mathbf{U}_a. \quad (11)$$

Dabei ist die Exponentialfunktion einer Matrix \mathbb{X} definiert durch die unendliche Summe

$$\exp \mathbb{X} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbb{X}^n}{n!}. \quad (12)$$

Mit dieser Definition gilt aber allgemein

$$\mathbb{U} \exp(\mathbb{X}) \mathbb{U}^{-1} = \sum_n \frac{\mathbb{U} \mathbb{X}^n \mathbb{U}^{-1}}{n!} = \sum_n \frac{(\mathbb{U} \mathbb{X} \mathbb{U}^{-1})^n}{n!} = \exp(\mathbb{U} \mathbb{X} \mathbb{U}^{-1}). \quad (13)$$

Infolgedessen können wir (11) umschreiben in

$$\mathbf{U}_a = \exp[2\pi i D(k \mathbb{G} - \mathbb{B})] \cdot \exp(-2\pi i D \mathbb{U} \mathbb{R} \mathbb{U}^{-1}) \mathbb{U} \mathbf{E} \quad (14)$$

oder mit (10)

$$\mathbf{U}_a = \exp[2\pi i D(k \mathbb{G} - \mathbb{B})] \cdot \exp(-2\pi i D \mathbb{U} \mathbb{R} \mathbb{U}^{-1}) \mathbf{U}_e. \quad (15)$$

Auf der rechten Seite tritt nunmehr statt der (einzeln unbekannten) Matrizen \mathbb{U} , \mathbb{R} nur das aus (9) von vornherein bekannte Produkt \mathbb{S} auf. Wir erhalten somit das Resultat

$$\mathbf{U}_a = \exp[2\pi i D(k \mathbb{G} - \mathbb{B})] \exp(-2\pi i D \mathbb{S}) \mathbf{U}_e. \quad (16)$$

Die Streumatrix \mathbb{M} ist das Produkt der beiden rechts stehenden Exponentialfaktoren. Der erste ist eine Diagonalmatrix mit Elementen vom Absolutbetrag 1. Die Multiplikation mit dieser bewirkt nur eine (zusätzliche) Phasenänderung der Amplituden U_{ah} gegeneinander. Für die Bestimmung von Intensitäten im Beugungsbild ist dieser Faktor ohne Interesse. Er wird erst von Bedeutung bei der Bestimmung der Intensitätsverteilung im elektronenmikroskopischen Bild der Strahlaustrittsfläche, wo sich die verschiedenen Partialwellen superponieren. Die eigentliche „Beugungsmatrix“ findet sich im zweiten Exponentialfaktor, der keine Diagonalmatrix mehr ist. (Da die Exponenten der beiden Faktoren als Matrizen nicht multiplikativ vertauschbar sind, können die beiden Exponentialfaktoren nicht zu einer Exponentialfunktion der Exponentensumme zusammengezogen werden.)

Für die Auswertung kann man die in (16) erhaltene Form der Streumatrix noch vereinfachen. Unter den üblichen experimentellen Bedingungen (keine wesentlichen Strahlen streifend gegen die Kristallgrenzebenen) sind die Elemente der Diagonalmatrix $(k \mathbb{G} - \mathbb{B})$ durchweg sehr groß gegen die Elemente von $\mathbb{G}^{-1} \mathbb{B} / 2\beta k$ und überdies nahezu gleich. \mathbb{S} ist also die Summe aus einem großen Vielfachen der Einsmatrix und einer kleinen restlichen Matrix. Wir definieren daher eine Diagonalmatrix

$$\mathbb{F} = 2\beta k \mathbb{G} (k \mathbb{G} - \mathbb{B} - c \mathbf{I}) \quad (17)$$

mit einer (positiv reellen) Zahl c , die wir so wäh-

len, daß die Summe der Matrixelemente von \mathfrak{F} (ihre „Spur“) nahe bei Null liegt. Substituieren wir $(k\mathfrak{G} - \mathfrak{B})$ in (16) mit Hilfe dieser neuen Matrix, so wird die Streumatrix

$$\begin{aligned}\mathfrak{M} &= \exp[2\pi i D(c\mathbf{1} + \mathfrak{G}^{-1}\mathfrak{F}/2\beta k)] \\ &\quad \cdot \exp\{-2\pi i D[c\mathbf{1} + \mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})/2\beta k]\} \\ &= \exp(i\pi\lambda D\beta^{-1}\mathfrak{G}^{-1}\mathfrak{F}) \\ &\quad \cdot \exp[-i\pi\lambda D\beta^{-1}\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})],\end{aligned}\quad (18)$$

da das Additionstheorem

$$\exp(\mathfrak{X} + \mathfrak{Y}) = \exp \mathfrak{X} \cdot \exp \mathfrak{Y}$$

für solche Matrizen \mathfrak{X} und \mathfrak{Y} gilt, für die $\mathfrak{X}\mathfrak{Y} = \mathfrak{Y}\mathfrak{X}$ ist.

Wählt man $c = kG_0 = k \cos \gamma_0$, so wird in praktisch hinreichender Näherung für alle h

$$F_{hh} = \beta[k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{b}_h)^2], \quad (19)$$

und damit F_{hh} ein geometrisch anschauliches Maß für die Abweichung der Strahlrichtung \mathbf{k} von der BRAGG-Bedingung für die Abbeugung h (bei der die EWALDSche Ausbreitungskugel durch den reziproken Gitterpunkt \mathbf{b}_h läuft). Diese F_{hh} sind „Anregungsfehler“-Potentiale von der Größenordnung der $\Phi_{g-h} = V_{gh}$, haben also die für \mathfrak{F} gewünschte Eigenschaft.

IV. Eigenschaften der Streumatrix

Nennen wir zur Abkürzung den ersten Faktor in (18), die „Phasenmatrix“, \mathfrak{P} , den zweiten Faktor \mathfrak{Q} .

Die Diagonalmatrix $\mathfrak{G}^{-1}\mathfrak{F}$ im Exponenten von \mathfrak{P} hat die Elemente

$$(\mathfrak{G}^{-1}\mathfrak{F})_{hh} = \frac{F_{hh}}{\cos \gamma_h} = (\mathfrak{F}\mathfrak{G}^{-1})_{hh} \quad (20)$$

und die Matrix \mathfrak{P} selbst ist unitär, d. h.

$$\mathfrak{P}^+ \mathfrak{P} = \mathbf{1}. \quad (21)$$

Die Matrix $\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})$ im Exponenten von \mathfrak{Q} hat die Elemente

$$[\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})]_{hh} = \frac{\Phi_0 + F_{hh}}{\cos \gamma_h} \quad (22)$$

und $[\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})]_{gh} = \frac{\Phi_{g-h}}{\cos \gamma_g}$ für $g \neq h$.

$\mathfrak{B} + \mathfrak{F}$ selbst ist HERMITESCH, d. h.

$$(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})^+ = \mathfrak{B} + \mathfrak{F}; \quad (23)$$

die adjungierte zu $\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})$ lautet dagegen $(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})\mathfrak{G}^{-1}$. Die adjungierte zu \mathfrak{Q} ist daher [mit

Definition (12) und Anwendung von (13)]

$$\begin{aligned}\mathfrak{Q}^+ &= \exp[i\pi\lambda D\beta^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})\mathfrak{G}^{-1}] \\ &= \mathfrak{G} \exp[i\pi\lambda D\beta^{-1}\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{B} + \mathfrak{F})]\mathfrak{G}^{-1} \\ &= \mathfrak{G}\mathfrak{Q}^{-1}\mathfrak{G}^{-1}.\end{aligned}\quad (24)$$

Aus (24) folgt für alle (ganzzahligen) Potenzen

$$(\mathfrak{Q}^n)^+ \mathfrak{G} (\mathfrak{Q}^n) = \mathfrak{G}. \quad (25)$$

Der resultierende Gesamtstrom durch die Strahlaustrittsfläche an der Kristallplatte kann nun leicht mit demjenigen an der Strahleintrittsfläche verglichen werden. Er ist bis auf einen universellen Faktor

$$\begin{aligned}\sum_h \cos \gamma_h \cdot |U_{ah}|^2 \\ &= \mathbf{U}_a^+ \cdot \mathfrak{G} \cdot \mathbf{U}_a = \mathbf{U}_e^+ \mathfrak{Q}^+ \mathfrak{P}^+ \cdot \mathfrak{G} \cdot \mathfrak{P} \mathfrak{Q} \mathbf{U}_e \\ &= \mathbf{U}_e^+ \mathfrak{Q}^+ \mathfrak{G} \mathfrak{Q} \mathbf{U}_e = \mathbf{U}_e^+ \mathfrak{G} \mathbf{U}_e \\ &= \sum_h \cos \gamma_h \cdot |U_{eh}|^2.\end{aligned}\quad (26)$$

Bei diesen Umformungen haben wir von (21) und (25) Gebrauch gemacht. Der gesamte Strahlstrom erscheint also durch die Beugung an der Kristallplatte unverändert, wie es nach den Randbedingungen (5) und (6) erwartet werden muß.

Wichtig für das Folgende ist noch eine Abschätzung über die Größe der Elemente von \mathfrak{Q} bzw. \mathfrak{Q}^n . Die Elemente der Matrix (25) sind

$$\sum_g \cos \gamma_g \cdot |(\mathfrak{Q}^n)_{gh}|^2 = \cos \gamma_h. \quad (27)$$

Da $\cos \gamma_h$ für alle h im betrachteten LAUE-Fall positiv ist, gilt dies auch für jedes Summenglied in (27), d. h.

$$|(\mathfrak{Q}^n)_{gh}| \leq \sqrt{\frac{\cos \gamma_h}{\cos \gamma_g}}. \quad (28)$$

Unter den früher genannten Bedingungen liegt das rechts stehende Verhältnis der Cosinus-Werte stets in der Größenordnung 1. Auch eine Potenzierung der Matrix \mathfrak{Q} läßt also deren Elementbeträge nicht über die durch (28) gegebene Schranke hinaus wachsen.

Die Darstellung (16) erlaubt in einfacher Weise Schlüsse auf das Ergebnis einer Inversion des Strahlenganges (Umkehrung der Kristalldicke von D in $-D$) und auf die Gültigkeitsschranken der FRIEDELschen Regel (vgl. Anm. ⁴), worauf hier aber nicht näher eingegangen werden soll.

⁴ H. NIEHRS, Z. Phys. **140**, 106 [1955].

V. Auswertung und Verwendung der Streumatrix

Es ist nun zu überlegen, ob und wie die Streumatrix praktisch gehandhabt, ausgewertet und verwendet werden kann. Die Phasenmatrix \mathfrak{P} macht als Diagonalmatrix überhaupt keine Schwierigkeiten. Für die eigentliche Streumatrix \mathfrak{Q} muß man auf die Definition (12) zurückgreifen. Danach ist

$$\begin{aligned}\mathfrak{Q} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\pi\lambda D\beta^{-1})^n}{n!} [\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{P} + \mathfrak{F})]^n \\ &= \mathfrak{G}^{-1} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\pi\lambda D\beta^{-1})^n}{n!} \cdot \mathfrak{U}_n\end{aligned}\quad (29)$$

mit den HERMITESCHEN Koeffizientenmatrizen

$$\mathfrak{U}_n = \mathfrak{U}_n^* = (\mathfrak{P} + \mathfrak{F}) \cdot [\mathfrak{G}^{-1}(\mathfrak{P} + \mathfrak{F})]^{n-1}. \quad (30)$$

Da diese im N -Strahlfall von der Ordnung N sind, erfordert ihre sukzessive Bestimmung (außer für $n=0$ und $n=1$) jeweils die Auswertung von $N(N+1)/2$ Produktsummen. (Der Rechenaufwand der Multiplikation mit einer Diagonalmatrix ist demgegenüber unerheblich.) Die für die praktische Verwendbarkeit entscheidende Frage ist, wieviele Glieder der Potenzreihe man braucht.

Die weitaus größten Elemente der Koeffizientenmatrix \mathfrak{U}_1 werden stets von der Matrix \mathfrak{F} herrühren und daher in der Diagonale stehen, während die übrigen Elemente (bei passender Anordnung der Zeilen und Spalten) mit zunehmendem Abstand von der Diagonale rasch abnehmen. Die größten Elemente von \mathfrak{U}_n werden sich daher annähernd wie die Potenzen F^n des größten Elements F von \mathfrak{U}_1 verhalten. Die größten Elemente der Matrixsummenglieder in der Reihenentwicklung von (29) werden also, wenn

$$Z = \pi\lambda D\beta^{-1}F \gtrsim 1 \quad (31)$$

ist, zunächst bis etwa zum Glied $n \sim Z$ anwachsen und etwa die Größe $Z^Z/Z!$ erreichen, während ihre Summe selbst nach (29) von der Größenordnung 1 bleibt. Für $Z > 1$ ist daher die Berechnung von \mathfrak{Q} durch Reihenentwicklung unrationell. Günstiger verfährt man nach dem Rechenschema

$$\mathfrak{Q}(D) = [\mathfrak{Q}(D/m)]^m,$$

d. h. die Exponentialreihe wird nur für eine hinreichend kleine Kristalldicke D/m angesetzt, der Wert für D dagegen durch anschließende Potenzierung bestimmt.

Mit der geringsten Gesamtzahl von Matrixmultiplikationen kommt man aus, wenn man eine (ganze,

nicht-negative) Zahl ν so wählt, daß $2^\nu = m \sim eZ$ ist. Um für $\mathfrak{Q}(D/2^\nu)$ mit solchem ν die Elementfehler $< 10^{-3}$ zu halten, genügt es, die Summierung (29) bis $n=4$ durchzuführen. Dazu sind 3 Matrixmultiplikationen notwendig, die auf HERMITESCHE Matrixprodukte führen. Hinzu kommen $\nu = \lg eZ / \lg 2$ Quadrierungen von Matrizen, die den Beziehungen (25) und (28) gehorchen. Die Gesamtzahl der bei diesem Vorgehen erforderlichen Produktsummenbildungen ist demnach

$$3 \frac{N(N+1)}{2} + \frac{\lg eZ}{\lg 2} N^2 \quad \text{gegenüber } N^4;$$

Produktsummenbildungen als Hauptrechenaufwand beim Eigenwertverfahren (vgl. Abschn. II). Ganz überschlägig ist hiernach das Streumatrixverfahren vorteilhafter als das Eigenwertverfahren, wenn

$$\lg eZ = \lg \frac{\lambda D F}{18 \text{ Volt } \text{\AA}^2} < (N^2 - 2) \lg 2 \quad (32)$$

ist. Nehmen wir ein Beispiel: Für $\lambda = 0,05 \text{ \AA}$, $D = 400 \text{ \AA}$ und einer Differenz der extremen \mathfrak{U}_1 -Elemente $= 2F = 100 \text{ Volt}$ wird $eZ = 58$, so daß $\nu = 6$ zu wählen ist. Die Anzahl der erforderlichen Produktsummenbildungen wird dann

	für N	= 3	4	5	6
beim Eigenwert-					
verfahren	N^4	= 81	256	625	1296
beim Streu-					
matrix-	$\frac{15N^2+3N}{2}$	= 72	126	195	279
verfahren					

Dieser Vergleich verdeutlicht die Überlegenheit des Streumatrixverfahrens für alle praktisch vorkommenden Mehrstrahlfälle.

Bei einem Vergleich der beiden Verfahren wird aber vornehmlich auch der Gesichtspunkt der Programmierung von Gewicht sein. Während das Eigenwertverfahren vier verschiedenartige Bestimmungsschritte, sukzessive Approximationen, zahlreich eingeschaltete Divisionen bei der Auswertung der Determinanten und andere Rechengänge umfaßt, verlaufen die Rechnungen beim Streumatrixverfahren fast durchweg nach einheitlichem Programm vorwärts: Multiplikation von Matrizen gleicher Ordnung. Ob mit oder ohne Benutzung von Rechenmaschinen, bedeutet das verminderte Programmarbeit, weniger Umstellungen in der Aufmerksamkeit des Rechners und geringere Wahrscheinlichkeit von Übertragungsfehlern.

Für den Fall, daß nur eine Primärwelle auf die Kristallplatte fällt, bleibt nur eine Spalte der Streumatrix von Bedeutung. Dann liegt der Gedanke nahe, den Rechenumfang noch dadurch zu vermindern, daß man allgemeine Formeln für die Koeffizientenmatrizen \mathfrak{U}_n tabelliert zur Verfügung stellt. Wenn man diese entsprechend dem angegebenen Rechenvorgang nur bis $n=4$ benötigt, ist die Textierung solcher Formeln noch durchführbar. (Für größere n nimmt sie rasch ungeheuerliche räumliche Ausmaße an!) Für $Z < 1$, wo keine Potenzierungen der Matrixsumme (29) nötig sind, wird man dann auch nur je eine Spalte der Matrizen \mathfrak{U}_n brauchen.

VI. Matrixoperatoren für die Einzelprozesse an den Grenzflächen

Zum Abschluß noch einige aufschlußreiche und anschauliche Ergebnisse, die aus der dynamischen Beugungstheorie streng, ohne die üblichen Vernachlässigungen der Reflexionen, gefolgert werden können. Das gesamte Geschehen an der Kristallplatte setzt sich aus vielfachen Reflexions- und Brechungsprozessen zusammen, die schematisch in Abb. 2 ge-

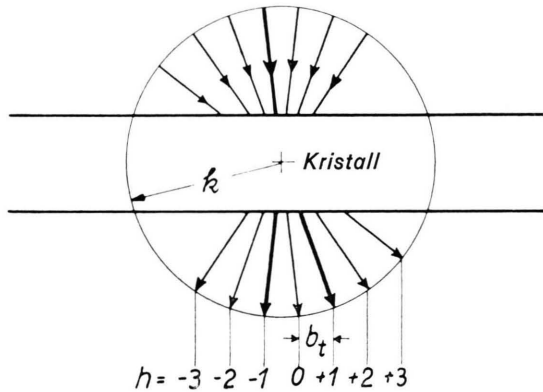


Abb. 2. Aufeinanderfolge der Prozesse und deren Operatoren: Reflexionen mit \mathfrak{R} und \mathfrak{R}' ; Durchläufe unter Beugung mit \mathfrak{Q} und \mathfrak{Q}' ; Austritte unter Reflexionsverlust mit $1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{R}$ und $1 - \mathfrak{R} \mathfrak{R}'$; Phasenverschiebung \mathfrak{B} nach Austritt an der Rückfläche. Die Pfeile bedeuten ganze Strahlbündel.

trennt skizziert sind. Jeder Pfeil bedeutet hier: außerhalb der Kristallplatte ein ganzes Bündel von Strahlen verschiedener Richtungen, wie sie in Abb. 1 einzeln angedeutet waren; innerhalb der Kristallplatte ein ganzes Bündel von Wellenfeldern verschiedener Strahlrichtungen. Die Pfeile bedeuten also nicht diskrete Strahlrichtungen selbst, sondern kenn-

zeichnen nur den Lauf ganzer Bündel entweder in Richtung von der Vorderfläche zur Rückfläche oder aber umgekehrt und damit die Aufeinanderfolge von Reflexions- und Brechungsprozessen. Macht man diese Unterscheidung, insbesondere der Strahlrichtungen von Wellenfeldern, von vornherein im Ansatz der Randbedingungen an den Grenzflächen (betrachtet also nicht das dynamische Gleichgewicht aller sich überlagernden Wellen), so kann man die Matrixoperatoren für die einzelnen Prozesse entwickeln.

Als erstes läßt sich ein Reflexionsoperator \mathfrak{R} für die (unmittelbare) Reflexion von Strahlbündeln gewinnen, die von der Vorderseite des Kristalls her anlaufen und nach dieser zurückgeworfen werden. \mathfrak{R} transformiert also die Amplitudenverteilung des anlaufenden Strahlbündels in diejenige des reflektierten. Dieser Operator ist bestimmt durch eine Matrixgleichung

$$\frac{1}{2\beta k} \cdot (\mathbf{1} + \mathfrak{R}) \mathfrak{G}^{-1} \mathfrak{B} (\mathbf{1} + \mathfrak{R}) + \mathfrak{R} (k \mathfrak{G} - \mathfrak{B}) \quad (33) \\ + (k \mathfrak{G} + \mathfrak{B}) \mathfrak{R} = 0.$$

Wegen der vorher erörterten Eigenschaften von $k \mathfrak{G} - \mathfrak{B}$ kann diese Gleichung nach \mathfrak{R} in Form einer Potenzreihe aufgelöst werden. Sie beginnt

$$\mathfrak{R} = -\frac{1}{4\beta k^2} \mathfrak{G}^{-2} \mathfrak{B} + \dots \ll \mathbf{1}, \quad (34)$$

d. h. sämtliche Elemente von \mathfrak{R} sind klein gegen 1; nur ein kleiner Bruchteil der anlaufenden Strahlung wird reflektiert.

Als zweites kann ein Beugungsoperator

$$\mathfrak{Q} = \exp(-2\pi i D \mathfrak{S}) \quad (35)$$

mit $\mathfrak{S} = \frac{1}{2\beta k} \mathfrak{G}^{-1} \mathfrak{B} (\mathbf{1} + \mathfrak{R}) + k \mathfrak{G} - \mathfrak{B} \quad (36)$

ermittelt werden (Abschnitt V enthielt die Näherung bei Vernachlässigung von \mathfrak{R}). Er beschreibt die Transformation eines Strahlbündels durch Beugung beim Durchlauf durch den Kristall von der Vorderfläche zur Rückfläche.

Zu \mathfrak{R} , \mathfrak{S} und \mathfrak{Q} gibt es entsprechende Operatoren \mathfrak{R}' , \mathfrak{S}' und \mathfrak{Q}' für die Transformationen von Strahlbündeln, die in Richtung von der Rückfläche zur Vorderfläche laufen. Ihre Definition unterscheidet sich von denen der erstgenannten [(33) bis (36)] lediglich dadurch, daß $+\mathfrak{G}$ durch $-\mathfrak{G}$ und $+D$ durch $-D$ zu ersetzen sind.

Der Austritt von Strahlbündeln aus dem Kristall an der Vorderfläche bzw. an der Rückfläche wird

noch „begleitet“ von Operatoren

$$(1 - \mathfrak{R} \mathfrak{R}') \quad \text{bzw.} \quad (1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{R}).$$

Sie korrigieren nachträglich summarisch die Reflexionsverluste, die beim Eintritt und Austritt an den Grenzflächen entstehen.

Schließlich kommt speziell beim Austritt aus der Rückfläche noch der schon früher behandelte Phasenoperator \mathfrak{P} hinzu, der davon herrührt, daß die Phasen sämtlicher Strahlen einheitlich auf die Vorderfläche bezogen sind.

Wir stellen nun als Beispiel den Gesamtoperator zusammen für die Umwandlung eines Strahlbündels nach Eintritt in den Kristall an der Vorderfläche + Durchlauf zur Rückfläche + Reflexion dortselbst + Durchlauf zur Vorderfläche + Reflexion dortselbst + Durchlauf zur Rückfläche + Austritt dortselbst: (Von rechts nach links zu lesen)

$$\mathfrak{P}(1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{R}) \mathfrak{Q} \mathfrak{R}' \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q}.$$

Da sich alle (nach verschieden oft wiederholter innerer Reflexion) aus der Rückfläche austretenden Strahlbündel additiv superponieren, ist die Matrix der resultierend austretenden Strahlen

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_a &= \mathfrak{P}(1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{R}) \mathfrak{Q} \sum_{n=0}^{\infty} (\mathfrak{R}' \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q})^n \cdot \mathbf{U}_e \\ &= \mathfrak{P}(1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{R}) \mathfrak{Q} (1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q})^{-1} \cdot \mathbf{U}_e. \end{aligned} \quad (37)$$

Die genäherte Gl. (16) vernachlässigte rechts den 2. und den 4. Faktor.

Auf analoge Weise stellen wir den Operator für die an der Vorderfläche austretenden Strahlbündel zusammen und erhalten durch Summation die Matrix der resultierend reflektierten Strahlen

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_r &= \left[\mathfrak{R} - (1 - \mathfrak{R} \mathfrak{R}') \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q} \sum_{n=0}^{\infty} (\mathfrak{R}' \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q})^n \right] \mathbf{U}_e \\ &= [\mathfrak{R} - (1 - \mathfrak{R} \mathfrak{R}') \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q} (1 - \mathfrak{R}' \mathfrak{Q}' \mathfrak{R} \mathfrak{Q})^{-1}] \mathbf{U}_e. \end{aligned} \quad (38)$$

Zu den gleichen Formeln gelangt man, wenn man in den Randbedingungen von vornherein nur das dynamische Gleichgewicht der resultierenden Strahlbündel ansetzt, ohne Strahlrichtungen im Kristall und Prozeßfolgen in Betracht zu ziehen. Die entwickelten Formeln für Einzelprozesse gestatten aber eine kausal-anschauliche Deutung des Strahlengleichgewichts und die Übertragung auf solche (praktisch bisher uninteressanten) Fälle, in denen der Strahlaustritt an mehreren Stellen lokalisiert erfolgt.

Der Einfluß der individuellen Feldkomponente auf die Elektronenemission der Metalle*

Von G. ECKER und K. G. MÜLLER

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Bonn
(Z. Naturforschg. 14 a, 511—520 [1959]; eingegangen am 25. Februar 1959)

This investigation considers the field electron emission of metals under the influence of space charges. Usually the field action of the space charge is taken into account by the average field F calculated from the Poisson equation. However the statistical distribution of the charge carriers causes field fluctuations on the surface of the metal. As the current density j depends exponentially on the field strength F , these fluctuations yield strong deviations from the relation $\bar{j} \approx j(F)$, where \bar{j} is the average current density. Accounting for the individual field component we find that in a certain range of space charge density the average current density \bar{j} is increased by several orders of magnitude. In the application this effect proves to be of great interest relative to the existence of the field arc.

Die Befreiung von Elektronen aus dem Inneren der Metalle ist von Bedeutung für viele Probleme der Physik. Zwei Prozesse, die sowohl getrennt wie auch gemeinsam wirken können, sind in diesem Zusammenhang von besonderer Bedeutung: die Temperaturemission einerseits und die Feldemission andererseits. Bei der Herleitung der entsprechenden

Emissionsgesetze wird stets ein über die Oberfläche des Metalls konstantes Feld vorausgesetzt. Diese Annahme trifft bei vielen experimentellen Anordnungen zu oder stellt zumindest eine gute Näherung dar, wenn die mittlere Stromdichte mit der Stromdichte des mittleren Feldes identifiziert werden kann.

Wir untersuchen hier den Fall, daß die Felder an der Metalloberfläche durch Ionenraumladungen erzeugt werden. Die Schwankungen der Raumladungsdichte verursachen Schwankungen des Feldes, die

* This research was supported in part by the United States Department of Army, through its European Research Office.