

cm<sup>2</sup> wäre dann durch ein ähnliches Modell zu erklären, wie es von READ<sup>2</sup> für die Besetzung von Akzeptorzuständen entlang einer Versetzungslinie angenommen wurde.

Die Oxydation der Oberfläche hat eine Abnahme der effektiven Oberflächenzustände zur Folge. Dieser Vorgang läßt sich in Übereinstimmung mit HANDLER<sup>3</sup> als Chemisorption von Sauerstoff verstehen. Für die zeitliche Abnahme der Oberflächenzustände ergibt sich derselbe Zusammenhang wie er von WOLSKY<sup>4</sup> für die Oxydation der Germaniumoberfläche durch Gewichtsänderung gefunden wurde. Die Aktivierungsenergie für die Bedeckung der Germaniumoberfläche mit einer monatomaren Sauerstoffschicht wurde von GREEN, KAFALAS und ROBINSON<sup>5</sup> zu 0,24 eV bestimmt. Der von uns aus

der Abnahme der Oberflächenzustände bei zunehmender Oxydationstemperatur ermittelte Wert betrug 0,22 eV.

Die Einwirkung verschiedener Gasatmosphären auf die Oberfläche hat eine Verschiebung des Oberflächenpotentials  $\Phi_s$  um maximal 0,052 eV zwischen Stickstoff mit Ammoniak und feuchtem Stickstoff bei 180 °K zur Folge. Hierbei ergibt sich eine qualitative Übereinstimmung mit den Untersuchungen von BRATTAIN und BARDEEN. Die Aktivierungsenergie  $E_A$  ändert sich bei Oxydation und in verschiedenen Gasatmosphären nicht.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die mit Mitteln und Geräten gewährte Unterstützung.

<sup>2</sup> W. T. READ JR., Phil. Mag. **45**, 119 u. 775 und **46**, 111 [1954].

<sup>3</sup> P. HANDLER, Semiconductor Surface Physics, University of Pennsylvania Press, Philadelphia 1957, S. 23.

<sup>4</sup> S. P. WOLSKY, J. Phys. Chem. Solids **8**, 114 [1959].

<sup>5</sup> M. GREEN, J. A. KAFALAS u. P. H. ROBINSON, Semiconductor Surface Physics, University Pennsylvania Press, Philadelphia 1957, S. 349.

## Dynamical X-ray Diffraction Theory of Spherical Waves

By N. KATO

Division of Engineering and Applied Physics,  
Harvard University, Cambridge, Massachusetts, U.S.A. \*  
(Z. Naturforsch. **15 a**, 369–370 [1960]; eingegangen am 29. Februar 1960)

The usual theory of X-ray diffraction assumes that the incident beam is a pure plane wave. This assumption may not be allowed if  $\Delta\theta \lesssim \Omega_0$ , where  $\Delta\theta$  is an angular width of reflection by a single crystal (assuming a plane wave) and  $\Omega_0$  is an angle in  $\mathbb{R}$ -space within which the FOURIER transform of the incident wave has appreciable value. Without using a lens system,  $\Omega_0$  of a spherical wave of wave number  $K$  cannot be reduced to less than  $1/(KL)^{1/2}$  at a distance  $L$  from the radiation source. Typical figures such as  $\Delta\theta \sim 10^{-5}$ ,  $K \sim 2\pi \cdot 10^8$  cm<sup>-1</sup> and  $L \sim 10$  cm show that  $\Delta\theta \lesssim \Omega_0$  in X-ray cases. Thus we have to consider intrinsically a diffraction theory of a spherical wave.

Since a spherical wave can be expressed as a superposition of plane waves, wave fields in a crystal also can be expressed as a superposition of crystal waves due to plane waves which are obtained by the ordinary theory. The resultant crystal waves can be expressed as follows:

Transmitted wave:

$$\Phi_0^{(j)} = \frac{i}{8\pi^2 K} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_0^{(j)} \exp i T^{(j)} \frac{dK_x dK_y}{\cos(\mathbb{R} \delta)}. \quad (1)$$

Reflected wave:

$$\Phi_g^{(j)} = \frac{i \exp 2\pi i(g \tau)}{8\pi^2 K} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_g^{(j)} \exp i T^{(j)} \frac{dK_x dK_y}{\cos(\mathbb{R} \delta)} \quad (2)$$

$$\text{where } T^{(j)} = (\mathbb{R} \tau_e) + (\mathbb{f}^{(j)} \tau - \tau_e), \quad (3)$$

$$(j) = 1 \text{ and } 2,$$

and  $C_0^{(j)}$  and  $C_g^{(j)}$  are amplitudes of a transmitted and reflected beam due to a plane wave  $\exp i(\mathbb{R} \tau)$ . The position vectors  $\tau$  and  $\tau_e$  drawn from the X-ray source denote respectively an observation point of the wavefield inside the crystal and a point on the incident surface of the crystal. Crystal wave vector  $\mathbb{f}^{(j)}$  and vacuum wave vector  $\mathbb{R}$  are connected by a tangential continuity condition;  $g$  is a reciprocal lattice vector.  $K_x$  and  $K_y$  are  $x$  and  $y$  components of  $\mathbb{R}$ . As shown in Fig. 1,  $x$  and  $z$  axes are taken in a plane containing the  $g$  and  $\tau$  vectors, the  $z$  axis being parallel to  $\mathbb{R}_B$ , that direction of  $\mathbb{R}$  which satisfies the BRAGG condition exactly.

Integration with respect to  $K_y$  has been carried out by a steepest descent method. Integration with respect to  $K_x$  has been carried out by a contour integral method with  $\mathbb{R}$  approximated as

$$(\mathbb{R} \tau) = K \tau + K_x x + 0(r/K) \quad (4)$$

and absorption effects neglected. The results are as follows:

$$\left| \sum_j \Phi_0^{(j)} \right|^2 = \frac{|\beta|}{32\pi K r} \left( \frac{\alpha - q}{\alpha + q} \right) J_1^2(t_0 |\beta| \sqrt{\alpha^2 - q^2}) \quad |q| < \alpha$$

$$= 0, \quad |q| > \alpha \quad (5)$$

$$\left| \sum_j \Phi_g^{(j)} \right|^2 = \frac{|\beta| \sqrt{\gamma_0/\gamma_g}}{32\pi K r} J_0^2(t_0 |\beta| \sqrt{\alpha^2 - q^2}) \quad |q| < \alpha$$

$$= 0, \quad |q| > \alpha \quad (6)$$

where  $|\beta|$  is a parameter proportional to the structure factor of the reflection concerned,  $J_0$  and  $J_1$  are the zeroth and first order BESSEL functions,  $\alpha t_0$  and  $q t_0$  have the meaning shown in Fig. 1, and  $\gamma_0$  and  $\gamma_g$  are the cosines of the angles between the normal of the in-

\* Now at H. H. Wills Physics Laboratory, Royal Fort, Bristol 8, England.



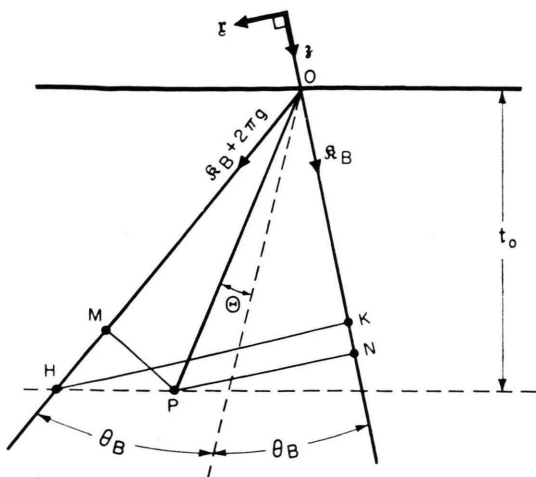


Fig 1. Distance from the incident surface of point H and of an observation point  $P=t_0$ ;  $a t_0 = \frac{1}{2} HK$  and  $q t_0 = PN - \frac{1}{2} HK$ .  $PN$  and  $HK$  are perpendicular to  $\mathcal{K}_B$  (or  $\beta$ ).  $MP$  is perpendicular to  $\mathcal{K}_B + 2\pi q$ .  $y$ -axis is normal to plane of figure.

cident surface and  $\mathfrak{R}_B$  and  $\mathfrak{R}_B + 2\pi g$  respectively. The argument can be alternatively expressed as

$$|\beta| \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_g}} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{N})^{1/2}, \quad (7)$$

where  $P_M$  and  $P_N$  are shown in Fig. 1.

That the wave fields are confined within a wedge-shaped region between  $\mathcal{R}_B$  and  $\mathcal{R}_B + 2\pi a$  corresponds

to the behavior of crystal waves propagating in a direction normal to the dispersion surface<sup>1-3, 5-7</sup>.

The present theory can explain hook-shaped Pendel-lösung fringes<sup>4</sup>, which are not explainable in terms of the plane-wave theory. Since  $J_0$  and  $J_1$  are oscillating functions we can expect fringe patterns. Eq. (7) shows that equal phase contours are given by hyperbolae whose asymptotes are  $\mathfrak{K}_B$  and  $\mathfrak{K}_B + 2\pi g$ . Hook-shaped fringes arise at the intersection of the hyperbolae with the exit surface of the crystal.

Wave bundle considerations<sup>1, 6, 8</sup> which are essentially the same approach as the stationary phase method<sup>9</sup> as pointed out by EWALD, are instructive from a physical standpoint. The fringes occur essentially due to interference between two wave bundles which correspond to the two conjugate wave points on the dispersion surface.

The author would like to express his thanks to Professor LANG for his encouragement during this work.

Financial support from the Office of Naval Research is gratefully acknowledged.

- <sup>1</sup> N. KATO, J. Phys. Soc., Japan **7**, 406 [1952].
- <sup>2</sup> M. v. LAUE, Acta Cryst. **5**, 619 [1952].
- <sup>3</sup> G. BORRMANN, Z. Phys. **127**, 297 [1950].
- <sup>4</sup> N. KATO and A. R. LANG, Acta Cryst. **12**, 787 [1959].
- <sup>5</sup> N. KATO, Acta Cryst. **11**, 885 [1958].
- <sup>6</sup> P. P. EWALD, Acta Cryst. **11**, 887 [1958].
- <sup>7</sup> E. H. WAGNER, Acta Cryst. **12**, 345 [1959].
- <sup>8</sup> N. KATO, in preparation.
- <sup>9</sup> for example, H. and B. S. JEFFREYS, Methods of Mathematical Physics, Cambridge University Press, Cambridge 1956, Chapter 17.

# BESPRECHUNG

**Monographs on the Physics and Chemistry of Materials.**  
**Experimental Techniques in Low-Temperature Physics.** Von GUY KENDALL WHITE. Clarendon Press, Oxford 1959, VIII, 328 S. mit 128 Abb. Preis geb 45/— net.

Diese Neuerscheinung stellt es sich zur Aufgabe, Physiker, Physikochemiker, Metallkundler und Ingenieure, die sich mit der Untersuchung irgendwelcher Materialien bei sehr tiefen Temperaturen befassen wollen, mit den notwendigen Anleitungen für solche Arbeiten zu versehen. So behandelt dieses Buch zunächst die Herstellung und die Messungen tiefer und tiefster Temperaturen, den Umgang mit verflüssigten Gasen im Laboratoriumsmaßstab, die grundsätzlichen Gesichtspunkte und einige Einzelheiten der Konstruktion von Kryostaten einschließlich der Probleme des Wärmeübergangs und der Temperaturregelung. Dazu kommen physikalische Daten über spezifische Wärmen, Ausdehnungszahlen, elektrische und thermische Leitfähigkeit von Festkörpern, die bei dem Bau von Tieftemperatur-Apparaten verwendet werden. Die Monographie enthält zwar viele Literaturhinweise auf technische Details, unterläßt aber auch nicht eine ausreichende Auseinandersetzung

der fundamentalen Prinzipien. Dadurch möchte das Buch auch Diplomanden und Doktoranden nützlich sein.

In dieser Eigenart, dem bei der praktischen kältetechnischen Arbeit Ratsuchenden Hilfe leisten zu wollen, unterscheidet sich das Büchlein von den bekannten kältephysikalischen Monographien etwa von BURTON, GRAYSON SMITH und WILHELM, JACKSON oder SQUIRE, welche diese Schwierigkeiten mehr oder weniger übergehen; diese deutschsprachige Monographie von H. HAUSEN andererseits wendet sich nach Umfang und Gründlichkeit an den Spezialisten. In Erinnerung an den Verlauf seines eigenen kältephysikalischen Trainings und mit dem sicheren Maßstab eigener Erfahrung gibt der Autor zu allen auftretenden Problemen klare Erläuterungen, die durch umfassende Hinweise besonders auf angelsächsische Literatur gestützt werden. Wer in Kürze solche Anleitung als Neuling auf dem Gebiet der Tieftemperatur-Experimentiertechnik sucht, wer sich insbesondere über die praktischen Aspekte der adiabatischen Magnetisierung und magnetischen Temperaturmessung im Bereich unterhalb von  $1^{\circ}\text{K}$  informieren will, wird mit Gewinn zu diesem Buch greifen.

E. JUSTI, Braunschweig.