

sen von Interesse, sondern dürften ganz allgemein für das Problem der dielektrischen Relaxationserscheinungen in Flüssigkeiten von Bedeutung sein, da hier ein Fall vorliegt, bei dem die mit einer „End-über-End-Drehung“ eines langgestreckten Moleküls verbundene Relaxation deutlich von der mit ande-

ren Drehmöglichkeiten verknüpften Relaxation getrennt ist.

Die Untersuchungen wurden im Physikalischen Institut der Universität Freiburg i. Br. durchgeführt. Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemie für finanzielle Beihilfen.

## Eine Erweiterung der kinematischen Theorie zur Beschreibung von Elektroneninterferenzen an Kristallen

Von H. FENGLER

Aus dem Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft \*, Berlin-Dahlem  
(Z. Naturforschg. 16 a, 1205—1214 [1961]; eingegangen am 3. Juni 1961)

Mathematisch stellt die kinematische Theorie der Elektroneninterferenzen an Kristallen den 1. Term in der Bornschen Entwicklung dar (1. Bornsche Näherung). In dieser Arbeit wird das 2. Näherungsglied ausgerechnet; zunächst für beliebige Kristallgestalt und dann für einen kugelförmigen Kristall sowie für die nach zwei Richtungen unendlich ausgedehnte Kristallplatte.

Zur Beschreibung der Elektronenstreuung an Kristallen gibt es zwei Theorien: die kinematische und die dynamische Theorie. Die kinematische Theorie nimmt an, daß die Streuwellen nur durch die einfallende Welle entstanden sind und daß sie weder untereinander noch mit der Primärwelle und dem Kristallpotential in Wechselwirkung stehen. Insbesondere werden alle Mehrfachstreuungen vernachlässigt, die eine durch die Primärwelle erregte Streuwellen im Kristall erleiden kann. Daher ist die Anwendung dieser Theorie auf kleine Kristalle beschränkt. Die dynamische Theorie behandelt die Elektronenbeugung an einer nach zwei Dimensionen unendlich ausgedehnten Kristallplatte. Der Zustand im Kristall wird durch eine Überlagerung unendlich vieler Blochscher Wellenfelder dargestellt, die durch Stetigkeitsforderungen auf den Begrenzungsfächeln der Kristallplatte mit der Primärwelle und den unendlich vielen Streuwellen im Außenraum verknüpft sind. Zur Bestimmung der Wellenfelder im Kristall und damit der Amplituden der Streuwellen müßte ein unendliches lineares Gleichungssystem gelöst werden. Die Aufgabe ist mathematisch nicht streng zu lösen, und das Gleichungssystem wird auf endlich viele Gleichungen reduziert. Oft kann man sich auf ein System aus zwei Gleichungen beschränken — auf den „Zweistrahlfall“. Man nimmt dabei an, daß im

Kristall nur zwei Wellenfelder und im Außenraum neben der Primärwelle nur eine Streuwellen mit großer Amplitude auftreten, während die Amplituden aller möglichen anderen Streuwellen vernachlässigbar klein sein sollen. Die Wechselwirkung beider Wellenfelder im Kristall wird berücksichtigt. Es gibt nun Experimente, die weder durch die kinematische Theorie noch durch den Zweistrahlfall der dynamischen Theorie beschrieben werden können; nämlich die durch „Umweganregung“ verursachten Intensitäts- und Lagenanomalien (vgl. z. B. <sup>1, 2</sup> und dort angegebene Literatur). Umweganregung bezeichnet den Vorgang, daß in eine feste Richtung Intensität nicht nur aus der Primärwelle gelangt, sondern auch aus anderen Streuwellen. Um diese Experimente mit der dynamischen Theorie zu behandeln, müßte man mindestens zum Dreistrahlfall übergehen. Deutungsversuche nach der dynamischen Theorie wurden unternommen <sup>3—5</sup>. In dieser Arbeit wird eine Deutung durch Erweiterung der kinematischen Theorie versucht. Mathematisch ist diese die 1. Näherung im Bornschen Verfahren. Es handelt sich also um die Diskussion der höheren Bornschen Näherungen. Im Abschnitt A wird das Bornsche Verfahren für einen Kristall von endlicher Ausdehnung erläutert. Der Abschnitt B enthält eine genauere Untersuchung der 2. Näherung für beliebige Kristallgestalt (B, 1), für

\* Abt. Prof. Dr. K. MOLIÈRE.

<sup>1</sup> Chr. MENZEL-KOPP, Ann. Phys., Lpz. (6) 9, 259 [1951].

<sup>2</sup> H. PFISTER, Ann. Phys., Lpz. (6) 11, 239 [1953].

<sup>3</sup> E. FÜES u. E. H. WAGNER, Z. Naturforschg. 6 a, 1, 79 [1951].

<sup>4</sup> E. H. WAGNER, Z. Naturforschg. 6 a, 133 [1951].

<sup>5</sup> K. KAMBE, J. Phys. Soc. Japan 12, 13 [1957], dort weitere Literatur.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

eine Kristallkugel (B, 2) und für eine in zwei Dimensionen unendlich ausgedehnte Platte (B, 3).

### A. Das Bornsche Näherungsverfahren für die Elektronenstreuung am Kristall

#### 1. Aufstellung der allgemeinen Gleichung

Der Kristall wird durch ein festes äußereres Potential  $V(r)$  beschrieben, an dem die ankommenden Elektronen einheitlicher Geschwindigkeit und Richtung gestreut werden. Es wird hier nur elastische Streuung in Betracht gezogen. Zur Ermittlung der Elektronenverteilung nach der Streuung muß die Lösung der 1-Teilchen-SCHRÖDINGER-Gleichung aufgesucht werden, die sich in großer Entfernung vom Streukörper aus einer einlaufenden ebenen Welle und auslaufenden Kugelwellen zusammensetzt:

$$\Delta \Psi(r) + (k^2 - U(r)) \Psi(r) = 0, \quad (1)$$

$$\Psi(r) \sim \exp\{i(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})\} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \frac{\exp(i k r)}{r} \quad \text{für große } r.$$

Es bedeuten:

$k = 2\pi/\lambda = \sqrt{2mE}/\hbar$ ;  $\lambda$  = Elektronenwellenlänge;  
 $E/e$  = Beschleunigungsspannung der Elektronen;  
 $\mathbf{k}_0 = k \mathbf{s}_0$ ;  $\mathbf{s}_0$  = Einheitsvektor in Einfallsrichtung;  
 $\mathbf{k} = k \mathbf{s}$ ;  $\mathbf{s}$  = Einheitsvektor in Streurichtung;  
 $U(r) = -(2m e/\hbar^2) V(r)$ ;  $V(r)$  = Kristallpotential.

Im Experiment wird der differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma$  gemessen:

$$d\sigma = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega, \quad (2)$$

$d\Omega$  ist ein infinitesimaler Raumwinkel. Es ist also die Amplitude  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$  der auslaufenden Kugelwelle auszurechnen.

Wellengleichung und Randbedingung können mit der GREENSchen Funktion

$$G(\mathbf{r} | \mathbf{r}') = \frac{\exp(i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

in eine Integralgl. zusammengefaßt werden:

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \exp\{i(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})\} \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\{i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(r') U(r') d^3r'. \end{aligned} \quad (3)$$

Dann ist

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp\{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\} \Psi(r) U(r) d^3r. \quad (4)$$

Das BORNsche Verfahren löst (3) durch Iteration

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \sum_n \psi_n(r); \quad \psi_0(r) = \exp\{i(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})\}, \\ \psi_n(r) &= -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\{i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_{n-1}(\mathbf{r}') U(r') d^3r'. \end{aligned} \quad (5)$$

Für  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$  ergibt sich:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0); \quad (6)$$

$$f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp\{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\} \psi_{n-1}(\mathbf{r}) U(r) d^3r.$$

Da  $U(r)$  bis auf einen konstanten Faktor das Potential eines (ideal angenommenen) Kristalls ist, kann der folgende Ansatz gemacht werden:

$$U(r) = \sum_h u_h \exp\{i(\mathbf{b}_h, \mathbf{r})\} c(r); \quad (7)$$

$h$  ist eine Abkürzung für das Tripel von ganzen Zahlen  $h^1, h^2, h^3$ ;

$$c(r) = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{r} \text{ innerhalb und auf der Begrenzung des Kristalls,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (8)$$

$\mathbf{b}_h = h^1 \mathbf{b}_1 + h^2 \mathbf{b}_2 + h^3 \mathbf{b}_3$  ist ein Vektor des reziproken Gitters, dessen Grundvektoren hier definiert sind durch  $(\mathbf{b}_j, \mathbf{a}_l) = 2\pi \delta_{jl}$ ;  $\mathbf{a}_l$  sind die Gittertransformationen. Dieser Ansatz legt es nahe, auch die GREENSche Funktion im FOURIER-Raum darzustellen<sup>6</sup>:

$$\frac{\exp\{i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{\exp\{i(\mathbf{k}', \mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{k}', \quad \varepsilon > 0. \quad (9)$$

Aus (5) bis (9) erhält man

$$\begin{aligned} f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) &= \frac{(-1)^n}{4\pi} \left[ \frac{1}{(2\pi)^3} \right]^{n-1} \sum_{h_1, \dots, h_n} u_{h1} \cdot u_{h2} \dots u_{hn} \\ &\cdot \int \dots \int \left\{ \int c(\mathbf{r}_1) \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{b}_{hn}, \mathbf{r}_1)\} d^3\mathbf{r}_1 \right\} \\ &\cdot \int c(\mathbf{r}_2) \exp\{-i(\mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{k}_{n-2} - \mathbf{b}_{hn-1}, \mathbf{r}_2)\} d^3\mathbf{r}_2 \\ &\cdot \int c(\mathbf{r}_n) \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0 - \mathbf{b}_{h1}, \mathbf{r}_n)\} d^3\mathbf{r}_n \quad (10) \\ &\cdot \frac{d^3\mathbf{f}_{n-1}}{k_{n-1}^2 - k^2 - i\varepsilon_{n-1}} \frac{d^3\mathbf{f}_{n-2}}{k_{n-2}^2 - k^2 - i\varepsilon_{n-2}} \dots \frac{d^3\mathbf{f}_1}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon_1}, \end{aligned}$$

$h_i$  ist eine Abkürzung für das Wertetripel  $h_i^1, h_i^2, h_i^3$ . Führt man hier die FOURIER-Transformierte der Gestaltfunktion  $c(\mathbf{r})$  ein<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned} s(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\tau} \int c(\mathbf{r}) \exp\{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\} d^3\mathbf{r} = \overline{s(-\mathbf{k})}, \\ \tau &= \text{Kristallvol.,} \end{aligned} \quad (11)$$

<sup>6</sup> Integrale von der Form (9) sind stets als Grenzwert für  $\varepsilon \rightarrow 0$  aufzufassen, ohne daß es im folgenden ausdrücklich hingeschrieben wird.

<sup>7</sup> Konjugiert komplexe Größen werden durch Querstriche gekennzeichnet.

dann wird aus (10)

$$f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^n \sum_{h_1, \dots, h_n} u_{h1} u_{h2} \dots u_{hn} \cdot \int \dots \int \frac{s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{b}_{hn}) s(\mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{k}_{n-2} - \mathbf{b}_{hn-1}) \dots s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0 - \mathbf{b}_{h1})}{(k_{n-1}^2 - k^2 - i\varepsilon_{n-1})(k_{n-2}^2 - k^2 - i\varepsilon_{n-2}) \dots (k_1^2 - k^2 - i\varepsilon_1)} d^3\mathbf{k}_1 \dots d^3\mathbf{k}_{n-1}. \quad (12)$$

$s(\mathbf{k})$  ist so normiert, daß der größte Wert  $s(0) = 1$  ist. Durch partielle Integration sieht man, daß  $s(\mathbf{k})$  asymptotisch mindestens wie  $1/k$  verschwindet.

Die Halbwertsbreite des Hauptmaximums von  $s$  ist sehr klein gegen die Gitterabstände im reziproken Gitter, wenn alle Kristalldimensionen groß gegen die Gitterkonstanten sind. Diese Tatsache wird später bei den Integrationen in (12) ausgenutzt werden.

$s(\mathbf{k})$  ist für eine Anzahl von Kristallformen von PATTERSON<sup>8</sup> ausgerechnet worden. Hier soll  $s(\mathbf{k})$  nur für die unendliche planparallele Platte und für die Kugel<sup>9</sup> angegeben werden:

a) Planparallele Platte der Dicke  $D$ <sup>10, 11</sup>:

$$s_P(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2 D} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^D \exp\{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r})\} d^3\mathbf{r} = \delta(k_x) \delta(k_y) \frac{1 - \exp\{-ik_z D\}}{ik_z D}, \quad (13)$$

$$s_P(\mathbf{k}) = \delta(k_x) \delta(k_y) \exp\{-ik_z(D/2)\} \frac{\sin k_z D/2}{k_z D/2}.$$

b) Kugel vom Radius  $R$ :

$$s(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\tau} \int_0^R \int_{-1}^{+1} \exp\{-ik_r x\} dx r^2 dr = \frac{4\pi}{\tau} \int_0^R \frac{\sin k_r}{k} r dr, \quad (14)$$

$$s(\mathbf{k}) = \frac{3}{(Rk)^3} [\sin Rk - Rk \cos Rk] \quad (\text{Abb. 1}).$$

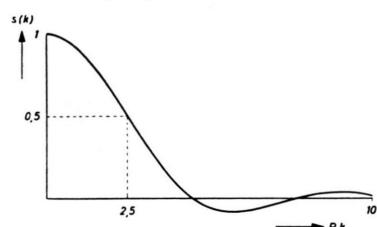


Abb. 1. Die FOURIER-Transformierte  $s(\mathbf{k})$  der Gestaltfunktion  $c(\mathbf{r})$  für die Kugel vom Radius  $R$ .

<sup>8</sup> A. L. PATTERSON, Phys. Rev. **56**, 972 [1939].

<sup>9</sup> H. EKSTEIN, Phys. Rev. **83**, 721 [1951].

<sup>10</sup> Da für die unendlich ausgedehnte Kristallplatte das Volumen unendlich groß ist, wurde die Definition von  $s_P$  etwas abgeändert; die Normierungskonstante wurde so gewählt, daß

$$\iint_{-\infty}^{+\infty} s_P(k_x, k_y, 0) dk_x dk_y = 1 \text{ ist.}$$

<sup>11</sup>  $\delta(x)$  bedeutet die DIRACSche Delta-Funktion: Ist  $f(x)$  in

## 2. Die Ausrechnung der Integrale

Für  $n=1$  erhält man aus (12) die Streuamplitude der kinematischen Theorie

$$f_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{\tau}{4\pi} \sum_h u_h s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_h); \quad \mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{b}_h. \quad (15)$$

Da die Halbwertsbreite von  $s$  für den Fall genügend großer Kristalle, auf den wir uns hier beschränken<sup>12</sup>, klein ist gegen die Abstände der reziproken Gitterpunkte, tritt nur für solche Streurichtungen starke Intensität auf, für die gilt:

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{b}_g + \boldsymbol{\chi}_g, \quad |\boldsymbol{\chi}_g| \ll |\mathbf{b}_g|. \quad (16)$$

Das sind die bekannten Interferenzbedingungen der kinematischen Theorie. Sie brauchen nicht exakt erfüllt zu sein; der kleine Vektor  $\boldsymbol{\chi}_g$  gibt die Abweichung an; er kann „vektorieller Anregungsfehler“ genannt werden. Für die Streurichtung  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \boldsymbol{\chi}_g$  sind in (15) alle Summanden  $h \neq g$  zu vernachlässigen:

$$f_1^g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -(\tau/4\pi) u_g s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_g). \quad (17)$$

Durch den Faktor  $s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_g)$  erhält der Reflex eine endliche Ausdehnung;  $|s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_g)|^2$  gibt Form und Ausdehnung des Intensitätsbereiches um den reziproken Gitterpunkt ( $g^1 g^2 g^3$ ) an.

**n = 2.**

$$f_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^2 \sum_{h_1, h_2} u_{h1} u_{h2} \cdot \int \frac{s(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{b}_{h2}) s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0 - \mathbf{b}_{h1})}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{k}_1. \quad (18a)$$

Das Integral wird nur an solchen Stellen wesentliche Werte haben, für die die Argumente der Funktion

$a \leq x \leq b$  stetig, dann soll sein

$$\int_a^b f(x') \delta(x' - x) dx' = \begin{cases} f(x) & \text{für } a \leq x \leq b, \\ 0 & \text{für } x < a; \quad x > b. \end{cases}$$

<sup>12</sup> Andererseits dürfen die Kristalle nicht zu groß sein, wenn die Streuamplitude schon durch die ersten Summanden in der Entwicklung (6) gut wiedergegeben werden soll. Die Abstände der reziproken Gitterpunkte sind von der Größenordnung  $1 \text{ \AA}^{-1}$ ; Abb. 1 zeigt dann, daß der Kristall „genügend“ groß ist, wenn seine linearen Abmessungen etwa  $50 \text{ \AA}$  betragen.

nen  $s$  angenähert übereinstimmen

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_1 - \mathbf{f} + \mathbf{b}_{h2} &\approx \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_0 - \mathbf{b}_{h1} \quad \text{oder} \\ \mathbf{f} &= \mathbf{f}_0 + \mathbf{b}_{h1} + \mathbf{b}_{h2} + \boldsymbol{\chi}_{h1+h2} = \mathbf{f}_{h1+h2} + \boldsymbol{\chi}_{h1+h2}. \end{aligned}$$

Das ist wieder die Interferenzbedingung (16). Für die Streurichtung  $\mathbf{f} = \mathbf{f}_g + \boldsymbol{\chi}_g$  muß dann  $h_1 + h_2 = g$  gesetzt werden, und in der Summe über  $h_2$  können alle Summanden  $h_2 \neq g - h_1$  vernachlässigt werden:

$$\begin{aligned} f_2^g(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0) &= 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^2 \sum_h u_h u_{g-h} \quad (18\text{ b}) \\ &\cdot \int \frac{s(\mathbf{f}_h + \boldsymbol{\chi}_g - \mathbf{f}_1) s(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h)}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{f}_1. \end{aligned}$$

Das Integral wird mit  $I_2$  abgekürzt; mit (11) ist

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{\tau^2} \iint c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) \exp\{-i(\boldsymbol{\chi}_g, \mathbf{r}_1)\} \\ &\cdot \int \frac{\exp\{i(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{f}_1 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \end{aligned}$$

Führt man in (18 b) für  $\mathbf{f}_1$  Kugelkoordinaten ein, so ist zunächst über die Oberfläche der Kugel vom Radius  $k_1$  und dann über  $k_1$  von 0 bis  $\infty$  zu integrieren:

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^\infty \left[ \int s(\mathbf{f}_h - \mathbf{f}_1 + \boldsymbol{\chi}_g) s(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h) k_1^2 d\Omega \right] \\ &\cdot \frac{dk_1}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon}. \end{aligned}$$

Wesentliche Beiträge liefert aber nur eine kleine Umgebung  $\mathcal{U}_h$  des Punktes  $\mathbf{f}_h$ ;  $k_1$  liegt also in der

$$\begin{aligned} \int \frac{\exp\{i(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{f}_1 &\approx \int_{-\infty}^{+\infty} \int \exp\{i(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} d^2 \boldsymbol{\chi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{i(k_1 - k_h)/k_h (\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} dk_1 \\ &= (2\pi)^2 \delta(\mathbf{r}_1^h - \mathbf{r}_2^h) \exp\{-i(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{i(k_1/k_h) (\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} dk_1. \end{aligned}$$

Für  $(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) > 0$  wird der Integrationsweg in der oberen komplexen  $k_1$ -Ebene geschlossen, für  $(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) < 0$  in der unteren:

$$\int \frac{\exp\{i(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon} d^3\mathbf{f}_1 \approx i \frac{(2\pi)^3}{2k} \delta(\mathbf{r}_1^h - \mathbf{r}_2^h) \exp\{-i(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \exp\{i(k/k_h)|(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\}. \quad (19)$$

Hier bedeutet  $\mathbf{r}_i^h$  die in der zu  $\mathbf{f}_h$  senkrechten Ebene liegende Komponente von  $\mathbf{r}_i$ . Wegen der  $\delta$ -Funktion hat der Vektor  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  die Richtung von  $\pm \mathbf{f}_h$ .

$$f_2^g(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^2 \sum_h u_h u_{g-h} I_2,$$

$$\begin{aligned} I_2 &= i \frac{(2\pi)^3}{2k} \frac{1}{\tau^2} \iint c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1^h - \mathbf{r}_2^h) \exp\{-i(\boldsymbol{\chi}_g, \mathbf{r}_1)\} \exp\{-i(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \\ &\cdot \exp\{i(k/k_h)|(\mathbf{f}_h, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\} \cdot d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Diese Gleichung wird weiter unten noch ausführlich diskutiert.

**n = 3.**

$$f_3(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^3 \sum_{h_1, h_2, h_3} u_{h1} u_{h2} u_{h3} \iint \int \frac{s(\mathbf{f} - \mathbf{f}_2 - \mathbf{b}_{h3}) s(\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1 - \mathbf{b}_{h2}) s(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_{h1})}{(k_2^2 - k^2 - i\varepsilon_2)(k_1^2 - k^2 - i\varepsilon_1)} d^3\mathbf{f}_1 d^3\mathbf{f}_2. \quad (21)$$

Nähe von  $k_h$ . Da  $k_h \approx k$  sehr groß ist gegen die Halbwertsbreite von  $s$ , kann die Integration über die Kugeloberfläche ersetzt werden durch eine Integration über die Tangentialebene, die die Kugel mit dem Radius  $k_1$  im Durchstoßungspunkt mit der Richtung  $\mathbf{f}_h$  berührt. Das Kugelflächenelement  $k_1^2 d\Omega$  wird ersetzt durch das Flächenelement  $dF$  der Tangentialebene. Die Näherung gilt für die Nachbarschaft des Punktes  $\mathbf{f}_h$ ; es müßte also über eine kleine Fläche  $dF$  und danach über  $k_1$  etwa von  $k_h - r$  bis  $k_h + r$  integriert werden. Da aber die von  $\mathbf{f}_h$  weiter entfernten Punkte ohnehin keinen nennenswerten Beitrag liefern, gleichgültig, ob sie auf der Kugeloberfläche oder auf der Tangentialebene liegen, kann die Integration über die gesamte Tangentialebene ausgedehnt werden; über  $k_1$  wird dann von  $-\infty$  bis  $+\infty$  integriert (vgl. 9).

$$\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_h \approx \frac{k_1 - k_h}{k_h} \mathbf{f}_h + \boldsymbol{\chi}; \quad (\text{Abb. 2})$$

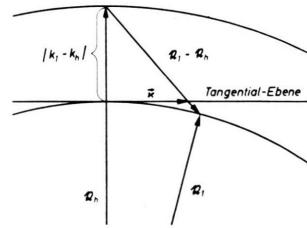


Abb. 2. Annäherung der Kugelfläche durch die Tangentialebene.

Schreibt man

$$\begin{aligned}\mathbf{f} - \mathbf{f}_2 - \mathbf{b}_{h3} &= -\mathbf{f}_2 + \mathbf{f}_{h1+h2} + \mathbf{f} - \mathbf{f}_{h1+h2+h3}, \\ \mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1 - \mathbf{b}_{h2} &= \mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_{h1+h2} + \mathbf{f}_{h1} - \mathbf{f}_1,\end{aligned}$$

dann wird das Integral  $I_3$  in (21) :

$$\begin{aligned}I_3 = \frac{1}{\tau^3} \int \int \int c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) c(\mathbf{r}_3) \exp\{-i(\mathbf{f} - \mathbf{f}_g, \mathbf{r}_1)\} \int \frac{\exp\{i(\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_{h1+h2}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{k_2^2 - k^2 - i\varepsilon_2} d^3\mathbf{f}_2 \\ \cdot \int \frac{\exp\{i(\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_{h1}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3)\}}{k_1^2 - k^2 - i\varepsilon_1} d^3\mathbf{f}_1 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3, \quad g = h_1 + h_2 + h_3.\end{aligned}$$

Für die Streurichtung  $\mathbf{f} \approx \mathbf{f}_g$  ist  $\mathbf{f} - \mathbf{f}_g = \mathbf{x}_g$  und in (21) ist in der Summe über  $h_3$  nur der Summand  $h_3 = g - (h_1 + h_2)$  zu berücksichtigen. Die Integrale über  $\mathbf{f}_1$  und  $\mathbf{f}_2$  sind von der gleichen Form wie das Integral (19). Das Ergebnis kann einfach abgeschrieben werden:

$$f_3^g(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^3 \sum_{h_1, h_2} u_{h1} u_{h2} u_{g-(h_1+h_2)} I_3,$$

$$\begin{aligned}I_3 = \frac{(2\pi)^6}{\tau^3} \left( \frac{i}{2k} \right)^2 \int \int \int c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) c(\mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_1^{(2)} - \mathbf{r}_2^{(2)}) \delta(\mathbf{r}_2^{(1)} - \mathbf{r}_3^{(1)}) \exp\{-i(\mathbf{x}_g, \mathbf{r}_1)\} \\ \cdot \exp\{-i(\mathbf{f}_{(2)}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \exp\{i(k/k_{(2)}) |(\mathbf{f}_{(2)}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\} \exp\{-i(\mathbf{f}_{(1)}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3)\} \\ \cdot \exp\{i(k/k_{(1)}) |(\mathbf{f}_{(1)}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3)|\} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3.\end{aligned} \quad (22)$$

$\mathbf{r}_i^{(n)}$  bedeutet die in der zu  $\mathbf{f}_{(n)} = \mathbf{f}_{h1+h2+\dots+h_n}$  senkrechten Ebene liegende Komponente von  $\mathbf{r}_i$ . Von (20) und (22) läßt sich leicht der allgemeine Fall ablesen

$$\begin{aligned}f_n^g(\mathbf{f}, \mathbf{f}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{-\tau}{(2\pi)^3} \right]^n \sum_{h_1, h_2, \dots, h_{n-1}} u_{h1} u_{h2} \dots u_{hn-1} u_{g-(h1+h2+\dots+hn-1)} I_n, \\ I_n = \frac{1}{\tau} \left[ \frac{(2\pi)^3}{\tau} \right]^{n-1} \left( \frac{i}{2k} \right)^{n-1} \int \int \dots \int c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) \dots c(\mathbf{r}_n) \delta(\mathbf{r}_1^{(n-1)} - \mathbf{r}_2^{(n-1)}) \delta(\mathbf{r}_2^{(n-2)} - \mathbf{r}_3^{(n-2)}) \dots \\ \cdot \delta(\mathbf{r}_{n-1}^{(1)} - \mathbf{r}_n^{(1)}) \exp\{-i(\mathbf{x}_g, \mathbf{r}_1)\} \exp\{-i(\mathbf{f}_{(n-1)}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \exp\{i(k/k_{(n-1)}) |(\mathbf{f}_{(n-1)}, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\} \dots \\ \cdot \exp\{-i(\mathbf{f}_{(1)}, \mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n)\} \exp\{i(k/k_{(1)}) |(\mathbf{f}_{(1)}, \mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n)|\} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \dots d^3\mathbf{r}_n.\end{aligned} \quad (23)$$

Gl. (23) gilt für Kristalle beliebiger Gestalt; sie müssen nur ein endliches Volumen besitzen, und die Registrierung der Streuelektronen muß in großer Entfernung vom Kristall erfolgen. Diese Voraussetzungen werden durch die Benutzung der asymptotischen Form (4) nötig. Um sie zu vermeiden, müßte man von der Int.-Gl. (3) ausgehen.

## B. Die zweite Näherung

### 1. Beliebige Kristallform

Im Integral  $I_2$  aus (20) wird die  $z$ -Achse des Koordinatensystems in die Richtung  $\mathbf{f}_h$  gelegt; in der zu  $\mathbf{f}_h$  senkrechten Ebene liegen die Koordinaten  $x, y$ .

$$\begin{aligned}I_2 = \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{i}{2k} \int c(x, y, z) \exp\{-i(\mathbf{x}_g, \mathbf{r})\} \\ \cdot \left[ \exp\{i\varrho_h z\} \int_{z' < z} c(x, y, z') \exp\{-i\varrho_h z'\} dz' \right. \\ \left. + \exp\{-i(k+k_h)z\} \int_{z' > z} c(x, y, z') \exp\{i(k+k_h)z'\} dz' \right] d^3\mathbf{r},\end{aligned}$$

$$I_2 \approx \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{i}{2k} \int_{z' < z} c(x, y, z) c(x, y, z') \exp\{-i(\mathbf{x}_g, \mathbf{r})\} \exp\{i\varrho_h(z - z')\} dz' d^3\mathbf{r}. \quad (24)$$

$\varrho_h = k - k_h = k - |\mathbf{f}_0 + \mathbf{b}_h|$  ist der Abstand des reziproken Gitterpunktes ( $h^1 h^2 h^3$ ) von der Ausbreitungskugel<sup>13</sup> und wird Anregungsfehler der Interferenz  $h$  genannt. Das zweite Integral in der eckigen Klammer ist proportional zu  $(k + k_h)^{-1}$  und kann, da  $k$  und  $k_h \approx k$  für die hier betrachteten Elektronenergien sehr groß ist, weggelassen werden. Nach leichter Umformung wird

$$\begin{aligned}I_2 = a [A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) + iS(\mathbf{x}_g; \varrho_h)], \\ a = \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{1}{2k} \int_{z' < z} c(x, y, z) c(x, y, z') dz' d^3\mathbf{r}.\end{aligned} \quad (25)$$

[Bei dieser Wahl von  $a$  ist  $S(0; 0) = 1$ .]

<sup>13</sup> Das ist eine Kugel vom Radius  $k$ , die durch den reziproken Gitterpunkt  $(0 0 0)$  geht. Der Vektor vom Mittelpunkt zum Punkt  $(0 0 0)$  ist der Wellenvektor  $\mathbf{f}_0$  der einfallenden Welle.

$$\begin{aligned} a A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) &= \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{1}{2k} \int_{z' < z} \int c(x, y, z) c(x, y, z') \sin[(\mathbf{x}_g, \mathbf{r}) - \varrho_h(z - z')] dz' d^3 r, \\ a S(\mathbf{x}_g; \varrho_h) &= \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{1}{2k} \int_{z' < z} \int c(x, y, z) c(x, y, z') \cos[(\mathbf{x}_g, \mathbf{r}) - \varrho_h(z - z')] dz' d^3 r. \end{aligned} \quad (26)$$

$$A(-\mathbf{x}_g; -\varrho_h) = -A(\mathbf{x}_g; \varrho_h); \quad A(0; 0) = 0. \quad S(-\mathbf{x}_g; -\varrho_h) = S(\mathbf{x}_g; \varrho_h); \quad S(0; 0) = 1.$$

$f_2^g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$  lässt sich also unabhängig von der Kristallform stets in der folgenden Weise darstellen:

$$f_2^g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = 2\pi^2 \left[ \frac{\tau}{(2\pi)^3} \right]^2 a \sum_h u_h u_{g-h} [A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) + i S(\mathbf{x}_g; \varrho_h)], \quad (27)$$

wo  $A$  eine antisymmetrische und  $S$  eine symmetrische Funktion ist bei gleichzeitiger Ersetzung beider Argumente  $\mathbf{x}_g, \varrho_h$  durch  $-\mathbf{x}_g, -\varrho_h$ .  $S$  hat ein Maximum bei  $|\mathbf{x}_g| = \varrho_h = 0$ . Folgerungen, die auf diesen Eigenschaften von  $A$  und  $S$  beruhen, gelten unabhängig von der betrachteten Kristallgestalt.

## 2. Der kugelförmige Kristall

Für eine Kristallkugel vom Radius  $R$  ist

$$c(x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{für } x^2 + y^2 + z^2 \leq R^2, \\ 0 & \text{für } x^2 + y^2 + z^2 > R^2. \end{cases}$$

Zur Ausrechnung von  $I_2$  werden Zylinderkoordinaten  $(r, \varphi, z)$  eingeführt

$$I_2 = \frac{(2\pi)^3}{\tau^2} \frac{i}{2k} \int_0^R \int_0^{2\pi} \exp\{-i|\mathbf{x}_g^{(x, y)}|r \cos \varphi\} d\varphi \int_{-\sqrt{R^2-r^2}}^{\sqrt{R^2-r^2}} \exp\{i(\varrho_h - \chi_g z)z\} \int_{-\sqrt{R^2-r^2}}^z \exp\{-i\varrho_h z'\} dz' dz r dr,$$

$$I_2 = a[A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) + i S(\mathbf{x}_g; \varrho_h)].$$

$$a A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) = \frac{(2\pi)^4}{\tau^2} \frac{1}{k \varrho_h} \int_0^R J_0(r |\mathbf{x}_g^{(x, y)}|) \left[ \cos(\varrho_h \sqrt{R^2 - r^2}) \frac{\sin[(\varrho_h - \chi_g z) \sqrt{R^2 - r^2}]}{(\varrho_h - \chi_g z)} - \frac{\sin(\chi_g z \sqrt{R^2 - r^2})}{\chi_g z} \right] r dr. \quad (28)$$

$$a S(\mathbf{x}_g; \varrho_h) = \frac{(2\pi)^4}{\tau^2} \frac{1}{k \varrho_h} \int_0^R J_0(r |\mathbf{x}_g^{(x, y)}|) \sin(\varrho_h \sqrt{R^2 - r^2}) \frac{\sin[(\varrho_h - \chi_g z) \sqrt{R^2 - r^2}]}{(\varrho_h - \chi_g z)} r dr. \quad (29)$$

$J_n(z)$  ist eine BESSEL-Funktion 1. Art der Ordnung  $n$ . Für  $A$  ergibt sich

$$A(\mathbf{x}_g; \varrho_h) = \frac{2}{R \varrho_h} \frac{2 \varrho_h - \chi_g z}{\varrho_h - \chi_g z} \left[ \frac{j_1(R \sqrt{\chi_g^2 + 4 \varrho_h^2 - 4 \varrho_h \chi_g z})}{R \sqrt{\chi_g^2 + 4 \varrho_h^2 - 4 \varrho_h \chi_g z}} - \frac{j_1(R |\mathbf{x}_g|)}{R |\mathbf{x}_g|} \right], \quad (30)$$

$$A(0; \varrho_h) = \frac{1}{R \varrho_h} \left[ 2 \frac{j_1(2R \varrho_h)}{R \varrho_h} - \frac{4}{3} \right], \quad (30')$$

$$A(\mathbf{x}_g; 0) = \frac{4}{(R |\mathbf{x}_g|)^2} \frac{\chi_g z}{|\mathbf{x}_g|} [3j_1(R |\mathbf{x}_g|) - \sin(R |\mathbf{x}_g|)] = -A(\mathbf{x}_g; \varrho_g), \quad (\chi_g z \approx \varrho_g), \quad (30'')$$

$$A(-\mathbf{x}_g; -\varrho_h) = -A(\mathbf{x}_g; \varrho_h), \quad A(0; 0) = 0$$

mit  $j_n(z) = \sqrt{\pi/2} z \cdot J_{n+1/2}(z)$  (sphärische BESSEL-Funktion)<sup>14</sup>. Die Normierungskonstante ist

$$a = \frac{(2\pi)^4}{\tau^2} \frac{R^4}{4k} = \frac{3}{8} \frac{(2\pi)^3}{\tau} \frac{R}{k}.$$

$\chi_g z$  ist die Komponente von  $\mathbf{x}_g$  in Richtung  $\mathbf{k}_g$ ; da sich alle Vektoren  $\mathbf{k}_h, \mathbf{k}_g, \mathbf{k}_0$  nur um kleine Winkel

unterscheiden, kann  $\chi_g z$  auch als Komponente von  $\mathbf{x}_g$  in Richtung  $\mathbf{k}_g$  aufgefaßt werden; d. h.  $\chi_g z \approx \varrho_g = k - k_g$ . Es genügt aber nicht, die Abweichung der Streurichtung von der durch die Interferenzbedingung vorgeschriebenen Richtung  $\mathbf{k}_g$  durch diesen einen Parameter zu charakterisieren.

Jeder reziproke Gitterpunkt ist von einem Intensitätsbereich umgeben, der mit wachsendem Kristallvolumen kleiner wird. (Seine Ausdehnung ist durch

<sup>14</sup> P. M. MORSE u. H. FESHBACH, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill, New York 1953.

die Halbwertsbreite von  $|s(\mathbf{f} - \mathbf{f}_g)|^2$  bestimmt.) Auf dem Teil der Ausbreitungskugel, der durch den Intensitätsbereich des Gitterpunktes ( $g^1 g^2 g^3$ ) geht, liegt der Wellenvektor der Streurichtung.  $\varrho_g$  gibt den Abstand dieses Flächenteiles vom Zentrum des Intensitätsbereiches an. Der zweite Parameter legt den Punkt fest, zu dem der Wellenvektor  $\mathbf{f}$  führt. Gl. (30) stellt also eine zweiparametrische Kurvenschar dar (z. B. sind  $|\chi_g|$  und  $\varrho_g$  die beiden Parameter, wenn  $A$  als Funktion von  $\varrho_h$  aufgefaßt wird). Übersichtlicher wird (30) für zwei Spezialfälle:

$$a) \quad \chi_g^z = |\chi_g| = \varrho_g, \quad (|\chi_g^{(x,y)}| = 0),$$

$\mathbf{f}$  ist parallel zu  $\mathbf{f}_g$ :

$$A(x_g; x_h) = \frac{2}{x_h(x_h - x_g)} \cdot \left[ j_1(2x_h - x_g) - (2x_h - x_g) \frac{j_1(x_g)}{x_g} \right], \quad (30 \text{ a})$$

$$x_h = R \varrho_h; \quad x_g = R \varrho_g,$$

$$A(x_g; 0) = \frac{4}{x_g^2} [3j_1(x_g) - \sin x_g].$$

b)  $\chi_g^z = \varrho_g = 0$ , der Vektor  $\mathbf{b}_g$  endet auf der Ausbreitungskugel:

$$A(y_g; x_h) = \frac{4}{x_h} \left[ \frac{j_1(\sqrt{y_g^2 + 4x_h^2})}{\sqrt{y_g^2 + 4x_h^2}} - \frac{j_1(y_g)}{y_g} \right], \quad (30 \text{ b})$$

$$y_g = R |\chi_g| = R |\chi_g^{(x,y)}|,$$

$$A(y_g; 0) \equiv 0; \quad A(y_g; -x_h) = -A(y_g; x_h); \\ A(-y_g; x_h) = A(y_g; x_h).$$

Die Ausrechnung der Funktion  $S$  ist komplizierter. Nur für den Fall  $|\chi_g^{(x,y)}| = 0$  ist  $S$  leicht auszurechnen<sup>15</sup>

$$a S(\varrho_g; \varrho_h) = \frac{(2\pi)^4}{\tau^2} \frac{1}{k \varrho_h (\varrho_h - \varrho_g)} \cdot \int_0^R \sin(\varrho_h x) \sin[(\varrho_h - \varrho_g)x] x dx,$$

$$\text{mit } a = \frac{(2\pi)^4}{\tau^2} \frac{R^4}{4k} = \frac{3}{8} \frac{(2\pi)^3}{\tau} \frac{R}{k},$$

$$n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} (-1)^{l-1} J_{-l-1/2}(z)$$

<sup>15</sup> Für Kristalle mit reellen FOURIER-Koeffizienten des Potentials (Kristalle mit Symmetriezentrum) tritt  $S$  nicht in der 2., sondern erst in der 3. Näherung auf. Nur wenn eine Streurichtung durch das Verschwinden eines Strukturfaktors in erster Näherung „ausgelöscht“ wird, treten  $A$  und  $S$  in gleicher Ordnung auf. Um die durch Umweganregung hervorgerufene Intensität in einer solchen Streurichtung zu berechnen, wird  $|\chi_g| = 0$  angenommen (unabhängig von der Kristallgestalt hat  $S$  für  $|\chi_g| = 0$  sein Maximum).

(sphärische NEUMANNsche Funktion) und  $x_h = R \varrho_h$ ,  $x_g = R \varrho_g$  ist:

$$S(x_g; x_h) = \frac{2}{x_h(x_h - x_g)} \left[ n_1(2x_h - x_g) + \frac{1}{(2x_h - x_g)^2} - n_1(x_g) - \frac{1}{x_g^2} \right], \quad (31)$$

$$S(0; x_h) = \frac{1}{x_h^2} \left[ 2n_1(2x_h) + \frac{2}{(2x_h)^2} + 1 \right], \quad (31')$$

$$S(x_g; 0) = \frac{4}{x_g^2} \left[ 2n_1(x_g) + \frac{2}{x_g^2} + \cos x_g \right] = S(x_g; x_g),$$

$$S(-x_g; -x_h) = S(x_g; x_h); \quad S(0; 0) = 1.$$

Für den Fall  $|\chi_g| = 0$ , d. h. wenn der Vektor  $\mathbf{b}_g$  exakt auf der Ausbreitungskugel liegt und die Streurichtung durch  $\mathbf{f} = \mathbf{f}_g$  gegeben ist, kann das Integral in (18 b) ohne Benutzung der Tangentialebenennäherung ausgerechnet werden. Das Ergebnis stimmt mit dem der Tangentialebenennäherung überein, wenn  $k_h = k$  gesetzt wird, was bei genügend hohen Elektronenenergien erlaubt ist. (Die Tangentialebenennäherung gilt ohnehin nur für solche Energien.)

In den Abb. 3 und 4 sind die Funktionen  $A(x_g; x_h)$  in Abhängigkeit von  $x_h$  mit  $x_g$  als Parameter bzw. in Abhängigkeit von  $x_g$  mit  $x_h$  als Parameter gezeichnet [Gl. (30 a)]. In den Abb. 5 und 6 wurden die Kur-

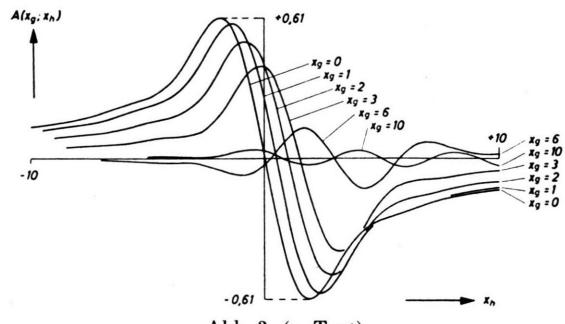


Abb. 3 (s. Text).

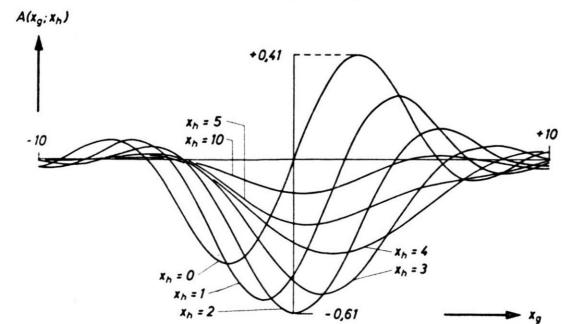


Abb. 4 (s. Text).

ven  $A(y_g; x_h)$  in der gleichen Weise gezeichnet [Gl. (30 b)]. Der charakteristische Unterschied zu den Kurven der Gl. (30 a) besteht darin, daß die Extremwerte der Kurven der Abb. 6 stets bei  $y_g = 0$  liegen, während die der Abb. 4 bei Werten  $x_g \neq 0$  liegen. Abb. 7 zeigt die Funktion  $S(x_g; x_h)$  abhängig von  $x_h$  mit  $x_g$  als Parameter [Gl. (31)].

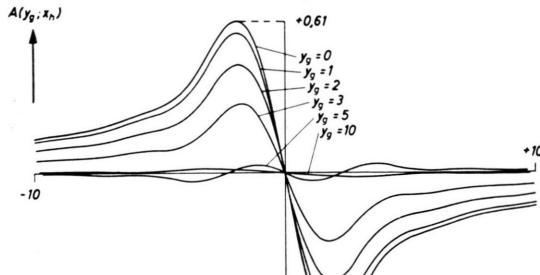


Abb. 5 (s. Text).

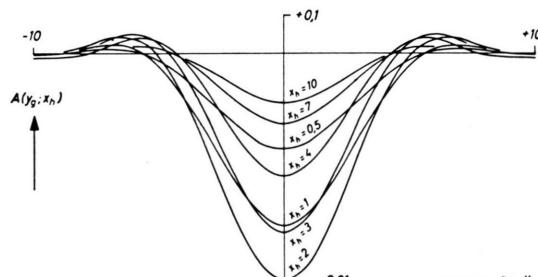


Abb. 6 (s. Text).

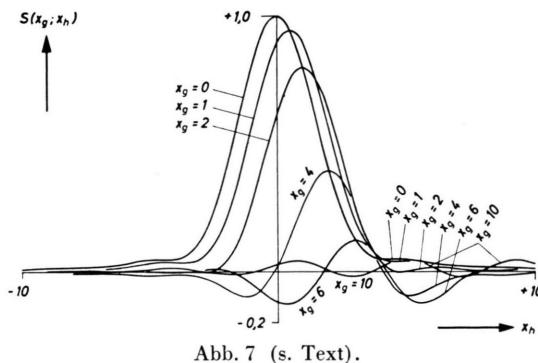


Abb. 7 (s. Text).

### 3. Die unendlich ausgedehnte planparallele Kristallplatte der Dicke $D$

Unabhängig von der vorliegenden Arbeit wurde dieser Fall von FUJIWARA<sup>16</sup> behandelt. FUJIWARA benutzt jedoch für die Iteration der Integral-Gl. (3) nicht die ebene Vakuumwelle, sondern eine ebene Welle in einem Raum mit dem konstanten Potential  $V_0 = -(\hbar^2/2m)e u_0$ . Die Wellenzahl ist dann  $K^2 = k^2 - u_0$ ;  $u_0$  ist der nulle FOURIER-Koeffizient in der Entwicklung (7) von  $U(r)$ ; er ist im Störglied weggelassen. Auch in der GREENSchen Funktion (9) steht an Stelle von  $k$  die neue Wellenzahl  $K$ . Die Gestaltfunktion  $c(r)$  in (7) bedingt, daß genau gesetzt werden müßte  $K^2 = k^2 - u_0 c(r)$ , so daß  $K$  ortsabhängig wird. Dann ist aber (9) nicht mehr die richtige GREENSche Funktion. Es läßt sich aber zeigen, daß sie angenehrt richtig ist, da  $|u_0| \ll k^2$  ist. FUJIWARA behauptet, daß die BORNsche Reihe durch die Verwendung von  $K$  statt  $k$  besser konvergiert würde. Diese Behauptung ist jedoch nicht sehr einleuchtend. In dieser Arbeit wird weiterhin die Vakuumwellenzahl  $k$  benutzt.

Natürlich kann bei der unendlichen Kristallplatte die Streuwelle nicht als auslaufende Kugelwelle angesetzt werden. Statt dessen wird man in Anlehnung an die dynamische Theorie fordern: vor der Eintrittsfläche ( $z < 0$ ) sollen die einfallende ebene Welle und reflektierte ebene Wellen auftreten; hinter der Austrittsstäche ( $z > D$ ) durchgelassene ebene Wellen.

Man kann zeigen, daß die Integral-Gl. (3) diese Forderungen erfüllt<sup>17</sup>. Die jetzt in (3) bei der Iteration auftretenden Integrale sind wegen der  $\delta$ -Funktionen in (13) nur noch eindimensional und sehr leicht auszurechnen. Man kann  $\psi_n(r)$  explizit angeben<sup>16</sup>. Hier soll jedoch nur die erste und zweite Näherung aufgeschrieben werden in der der vorangegangenen Nummer analogen Formulierung, um die Funktionen  $A$  und  $S$  für zwei so verschiedene Kristallformen wie Platte und Kugel zu vergleichen. Aus (5), (7) bis (9) und (13) ergibt sich

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_h u_h \int \frac{\exp\{i(\mathbf{k}', r)\}}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon} \delta(k'x - k_h x) \delta(k'y - k_h y) \frac{1 - \exp\{-i(k'z - k_h z)D\}}{(k'z - k_h z)} d^3\mathbf{k}', \\ \psi_1(r) &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_h u_h \exp\{i(\mathbf{k}_h, r)\} \exp\{-i k_h z\} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{i k'z z\} - \exp\{-i k'z(D-z)\} \cdot \exp\{i k_h z D\}}{(k'z - k_h z)(k'z^2 - k_h z^2 - i\varepsilon)} dk'z. \end{aligned} \quad (32)$$

<sup>16</sup> K. FUJIWARA, J. Phys. Soc., Japan **14**, 1513 [1959].

<sup>17</sup> Man entwickelt  $\psi(r)$  in eine 2-dimensionale FOURIER-Reihe, deren Koeffizienten von  $z$  abhängen. Aus (3) wird dann

eine 1-dimensionale Integral-Gl., die unmittelbar das behauptete Verhalten zeigt (mündliche Mitteilung von Herrn Dr. KAMBE).

Der Vektor  $\mathfrak{K}_h$  hat den Betrag  $K_h = k$  und die  $x, y$ -Komponenten  $K_h^x = k_h^x, K_h^y = k_h^y$ ; es ist also  $K_h^{z^2} = k^2 - k_h^{x^2} - k_h^{y^2}$ <sup>16</sup>. Unter  $K_h^z$  wird im folgenden stets die positive Wurzel verstanden

$$K_h^z = +\sqrt{k^2 - (k_h^{x^2} + k_h^{y^2})}.$$

Die Integration läßt sich sehr einfach in der komplexen  $k_z'$ -Ebene durchführen. Man muß die drei Fälle  $z < 0, 0 \leq z \leq D$  und  $z > D$  unterscheiden, um festzulegen, ob der Integrationsweg in der oberen oder unteren Halbebene zu schließen ist:

$$z < 0: \quad \psi_1(\mathbf{r}) = \sum_h \frac{u_h}{2 K_h^z} \exp\{i(\mathfrak{k}_h, \mathbf{r})\} \exp\{-i(K_h^z + k_h^z)z\} \frac{1 - \exp\{i(K_h^z + k_h^z)D\}}{K_h^z + k_h^z}. \quad (33 \text{ a})$$

$$0 \leq z \leq D: \quad \psi_1(\mathbf{r}) = \sum_h \frac{u_h}{2 K_h^z} \exp\{i(\mathfrak{k}_h, \mathbf{r})\} \left[ \frac{1 - \exp\{i(K_h^z - k_h^z)z\}}{K_h^z - k_h^z} + \frac{1 - \exp\{i(K_h^z + k_h^z)(D-z)\}}{K_h^z + k_h^z} \right]. \quad (33 \text{ b})$$

$$z > D: \quad \psi_1(\mathbf{r}) = \sum_h \frac{u_h}{2 K_h^z} \exp\{i(\mathfrak{k}_h, \mathbf{r})\} \exp\{i(K_h^z - k_h^z)z\} \frac{\exp\{-i(K_h^z - k_h^z)D\} - 1}{K_h^z - k_h^z}. \quad (33 \text{ c})$$

Für  $z < 0$  setzt sich  $\psi_1(\mathbf{r})$  aus ebenen Wellen zusammen, die sich von der Eintrittsfläche  $z = 0$  fortbewegen (reflektierte Wellen). Im Intervall  $0 \leq z \leq D$  gibt es zwei Anteile: der eine pflanzt sich in positiver  $z$ -Richtung fort (auf die Austrittsfläche  $z = D$  zu), der andere bewegt sich in umgekehrter Richtung auf die Eintrittsfläche  $z = 0$  zu (an der Austrittsfläche  $z = D$  reflektierte Wellen). Für  $z > D$  gibt es nur ebene Wellen, die von der Austrittsfläche  $z = D$  mit positiver  $z$ -Komponente des Wellenvektors auslaufen. Dieses Verhalten stimmt mit der oben geforderten Randbedingung überein. Die reflektierten Anteile sind nur bei sehr kleinem Neigungswinkel der einfallenden Welle gegen die Grenzfläche  $z = 0$  wesentlich. Dieser Fall soll im folgenden ausgeschlossen werden. Dann wird aus (33 b)

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \sum_h \frac{u_h}{2 K_h^z} \frac{\exp\{i(\mathfrak{k}_h, \mathbf{r})\} - \exp\{i(\mathfrak{K}_h, \mathbf{r})\}}{\zeta_h} \quad \text{für } 0 \leq z \leq D. \quad (34)$$

$\zeta_h = K_h^z - k_h^z$  ist die Entfernung des reziproken Gitterpunktes ( $h^1 h^2 h^3$ ) von der Ausbreitungskugel in der zur Kristallbegrenzung senkrechten Richtung.

Nach Gl. (5) ist

$$\begin{aligned} \psi_2(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{h_1, h_2} \frac{u_{h_1} u_{h_2}}{2 K_{h_1} \zeta_{h_1}} \int \frac{\exp\{i(\mathfrak{k}', \mathbf{r})\}}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon} \int [\exp\{-i(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k}_{h_1+h_2}, \mathbf{r}')\} \\ &\quad - \exp\{-i(\mathfrak{k}' - \mathfrak{K}_{h_1} - \mathfrak{b}_{h_2}, \mathbf{r}')\}] c(\mathbf{r}') d^3 r' d^3 k' \\ &= -\frac{1}{4\pi i} \sum_{h, g} \frac{u_h u_g \zeta_h}{K_h^z \zeta_g} \exp\{i(\mathfrak{k}_g, \mathbf{r})\} \exp\{-i k_g^z z\} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{i k' z\} - \exp\{-i k' z(D-z)\} \cdot \exp\{i k_g^z D\}}{(k'^z - k_g^z)(k'^{z^2} - K_g^{z^2} - i\varepsilon)} dk'^z \right. \\ &\quad \left. - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{i k' z\} - \exp\{-i k' z(D-z)\} \cdot \exp\{i(K_h^z + b_{g-h}^z)D\}}{(k'^z - [K_h^z + b_{g-h}^z])(k'^{z^2} - K_g^{z^2} - i\varepsilon)} dk'^z \right\}. \end{aligned}$$

Das sind wieder Integrale von der Form (32). Beachtet man noch

$$K_h^z + b_{g-h}^z = K_h^z - k_h^z + k_h^z + b_{g-h}^z = \zeta_h + k_g^z,$$

dann ergibt sich für  $z > D$

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \sum_{h, g} \frac{u_h u_g \zeta_h}{K_h^z K_g^z} \exp\{i(\mathfrak{K}_g, \mathbf{r})\} \left[ \frac{\exp\{-i \zeta_g D\} - 1}{\zeta_h \zeta_g} - \frac{1 - \exp\{i(\zeta_h - \zeta_g)D\}}{\zeta_h (\zeta_h - \zeta_g)} \right]. \quad (35)$$

Um das mit den Ergebnissen beim kugelförmigen Kristall zu vergleichen, soll in (33 c) und (35) noch ein gemeinsamer Phasenfaktor herausgezogen werden, so daß in  $\psi_1(\mathbf{r})$  die Strukturamplituden  $u_g$  mit einer reellen Funktion des Anregungsfehlers multipliziert werden. Setzt man  $\frac{1}{2}D \zeta_g = x_g$ , dann wird

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{D}{i} \exp\{-i x_g\} \sum_g \frac{u_g}{2 K_g^z} \exp\{i(\mathfrak{K}_g, \mathbf{r})\} \frac{\sin x_g}{x_g}, \quad z > D. \quad (36)$$

$$\psi_2(\mathbf{r}) = -\frac{D}{i} \exp\{-i x_g\} \sum_g \frac{1}{2 K_g^z} \exp\{i(\mathfrak{K}_g, \mathbf{r})\} \sum_h \frac{D}{2} \frac{u_h u_{g-h}}{2 K_h^z} [A(x_g; x_h) + i S(x_g; x_h)], \quad z > D. \quad (37)$$

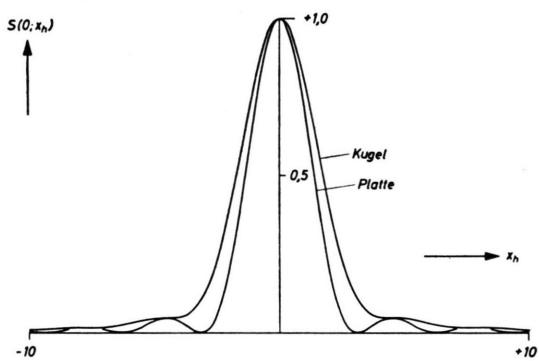
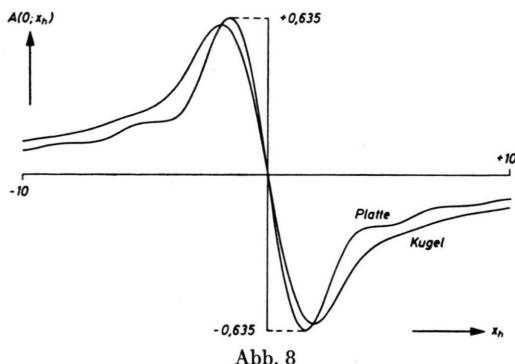


Abb. 8 u. 9. Die Funktionen  $A(0; x_h)$  und  $S(0; x_h)$  für die unendliche Kristallplatte und für den kugelförmigen Kristall.

Die Funktionen  $A$  und  $S$  sind bei gleichzeitiger Ersetzung beider Argumente durch ihre negativen Werte antisymmetrisch bzw. symmetrisch:

$$A(x_g; x_h) = \frac{1}{x_h} \left[ \frac{\sin(2x_h - x_g) - \sin x_g}{2(x_h - x_g)} - \frac{\sin x_g}{x_g} \right], \quad (38)$$

$$A(x_g; 0) = j_1(x_g) = -A(x_g; x_g), \quad (38')$$

$$S(x_g; x_h) = \frac{1}{2x_h} \left[ \frac{\cos x_g - \cos(2x_h - x_g)}{x_h - x_g} \right], \quad (39)$$

$$S(x_g; 0) = \frac{\sin x_g}{x_g} = S(x_g; x_g). \quad (39')$$

Die Abb. 8 und 9 zeigen die Funktionen

$$A(0; x_h) = \frac{1}{x_h} \left[ \frac{\sin 2x_h}{2x_h} - 1 \right]$$

$$\text{und} \quad S(0; x_h) = \left( \frac{\sin x_h}{x_h} \right)^2$$

zusammen mit den entsprechenden Funktionen für die Kugel. Trotz der sehr verschiedenen geometrischen Kristallformen stimmen doch die Funktionen der Anregungsfehler qualitativ überein.

Herrn Prof. Dr. K. MOLIÈRE danke ich sehr für die Förderung dieser Arbeit. Den Herren Dr. K. KAMBE Dr. H. NIEHRS und Dr. E. H. WAGNER bin ich für viele Diskussionen und Ratschläge zu Dank verpflichtet. Besonderer Dank gebührt Herrn. H.-J. KRAUSS, der alle numerischen Rechnungen ausführte und die Abbildungen zeichnete. Der Max-Planck-Gesellschaft danke ich für die Gewährung eines Stipendiums.

## Zur theoretischen Beschreibung von Umweganregungen bei Elektroneninterferenzen an Kristallen

Von H. FENGLER

Aus dem Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft \*, Berlin-Dahlem  
(Z. Naturforschg. 16 a, 1214—1223 [1961]; eingegangen am 18. Juni 1961)

In einer vorangegangenen Arbeit wurden allgemeine Formeln für die Streuintensität in einer Interferenzrichtung bis zur 2. Bornschen Näherung angegeben. Ihre physikalischen Aussagen werden hier diskutiert. Die Ergebnisse sind: 1. Die FRIEDELSche Regel verliert bereits in der zweiten Näherung ihre Gültigkeit. 2. Die Intensitätsformel der durch die zweite Bornsche Näherung erweiterten kinematischen Theorie geht für große Anregungsfehler der Umwegtripel und kleine Kristalle in die aus dem Zweistrahlfall der dynamischen Theorie folgende Formel über, wenn in dieser die BETHE-schen Zusatzpotentiale berücksichtigt sind. 3. Lagen- und Intensitätsanomalien bei Interferenzen im konvergenten Bündel sowie das Auftreten verbotener Reflexe können erklärt werden. Als Beispiel wird die Intensität des (222)-Reflexes von Ge in Abhängigkeit vom Azimutwinkel berechnet. 4. Durch Hinzunahme der zweiten Näherung wird die durch das Quadrat des Volumens dividierte Intensität eine um einen konstanten Wert gedämpft oszillierende Funktion der Kristallgröße.

Die Beschreibung der Elektronenstreuung an Kristallen mit der 1. Bornschen Näherung heißt kinematische Theorie. Eine Erweiterung durch die 2. Näherung wurde in einer vorangegangenen Arbeit<sup>1</sup> vorgenommen. Die physikalischen Aussagen der dort

gewonnenen allgemeinen Formeln sollen jetzt diskutiert werden. Im Abschnitt A wird die FRIEDELSche Regel untersucht, in B die 2. Näherung mit dem Zweistrahlfall der dynamischen Theorie verglichen. In diesen beiden Abschnitten sind keine Voraus-

\* Abt. Prof. Dr. K. MOLIÈRE.

<sup>1</sup> H. FENGLER, Z. Naturforschg. 16 a, 1205 [1961], voran-

stehend. Diese Arbeit wird im folgenden als I zitiert; I, (24) z. B. bedeutet: Gl. (24) aus I.