

Abb. 5. Abhängigkeit des integralen Intensitätsüberschusses U [Gl. (5)] von der abgeätzten Schichtdicke d . oooo „dunkle“ Cu(200)-Linie (BRAGG-Fall) $\alpha = 39^\circ$; ■■■■■ symmetrische Helldunkel-Linie Cu(111) (symmetr. LAUE-Fall) $\alpha = 120^\circ$.

wird auch eine Abnahme der mittleren Verschwenkung der kohärent streuenden Bereiche in der gleichen Richtung wirken. Die gegenseitige Verschwenkung der einzelnen kohärent streuenden Bereiche bewirkt nämlich eine Überlagerung und damit teilweise Auslöschung der hellen und dunklen Linienanteile. Es gelang jedoch, auch den Einfluß der Größe der kohärent streuenden Bereiche auf den Intensitätsüberschuß der symmetrischen Helldunkel-Linien vom Einfluß der Verschwenkung zu isolieren.

KOSSEL-Kurven von durch Zug plastisch deformierten Einkristallen zeigten nämlich an bestimmten Stellen ihres Umfangs eine starke Verbreiterung, während sie an zwei Stellen unverbreitert blieben. Diese ungleichmäßige Verbreiterung kann auf die Verschwenkung kleiner Bereiche bei der plastischen Deformation zurückgeführt werden, wenn sie nur um eine ganz bestimmte vom Gleitsystem abhängige Achse erfolgt. Diese Erscheinung ist bereits von STAUBWASSER¹² an Al nachgewiesen worden.

Es wurde deshalb eine symmetrische Helldunkel-Linie (111) von Cu an der Stelle vermessen, die

keine Verbreiterung aufwies. Sie zeigte bei einer plastischen Deformation um nur 0,5% eine Abnahme des maximalen Intensitätsüberschusses gegenüber der Untergrundintensität um 40%.

Die hier aufgetretene Abnahme des Intensitätsüberschusses kann nach Gl. (4) und Abb. 1 nur durch eine Verkleinerung der kohärent streuenden Bereiche bei der plastischen Deformation gedeutet werden.

4. Zusammenfassung

Als Ergebnis kann also zusammengefaßt werden, daß die Gitterquelleninterferenzen weitgehend störungsempfindlich sind. Dabei sind zwei Erscheinungen streng voneinander zu trennen:

1. erhält man mit abnehmender Sekundärextinktion, d. h. bei zunehmendem Störungsgrad eine Vergrößerung des integralen Intensitätsüberschusses der nahezu dunklen Linien;

2. nimmt der Intensitätsüberschuß symmetrischer Helldunkel-Linien mit Verkleinerung der kohärent streuenden Bereiche, d. h. mit zunehmendem Störungsgrad, ab.

Die erste Erscheinung entspricht der Zunahme des integralen Reflexionsvermögens bei Zustrahlung von außen. Das ist verständlich, da nach Verlassen des ersten kohärent streuenden Bereiches die Kohärenz zwischen den Quellen und den RÖNTGEN-Wellen zerstört ist. Gerade diese Kohärenz ist aber für die charakteristischen Erscheinungen der Gitterquelleninterferenzen, nämlich die helldunkle Feinstruktur, verantwortlich. Nur die symmetrischen Helldunkel-Linien im LAUE-Fall zeigen diese dynamisch bedingte Feinstruktur ungestört. Sie weisen deshalb auch die unter 2. aufgeführte entgegengesetzte Störungsempfindlichkeit auf.

Beide Erscheinungen konnten in qualitativer Übereinstimmung zu den einleitend dargelegten theoretischen Berechnungen experimentell bestätigt werden. Die in Abschn. 2 abgeleiteten Gleichungen [Gl. (4)] lassen grundsätzlich auch eine Berechnung der Größe kohärent streuer Bereiche aus den Intensitätsmessungen an symmetrischen Helldunkel-Linien zu. Das setzt allerdings noch eine Korrektur der Meßergebnisse voraus, die die mittlere Verschwenkung der kohärent streuenden Bereiche, den endlichen Brennfleckdurchmesser und den Anteil von Bremsstrahlung am Untergrund berücksichtigen müßte.

Herrn Prof. Dr. W. MESSERSCHMIDT danken wir für das dieser Arbeit entgegengebrachte Interesse.

¹² W. STAUBWASSER, Acta Metall. 7, 43 [1959].



Vergleichende Untersuchungen von Interferenzen bei kohärenter und inkohärenter Lage der Röntgen-Strahlenquelle zum Kristallgitter¹

Von W. SCHÜLKE und O. BRÜMMER

Aus dem Institut für experimentelle Physik der Universität Halle/Saale
(Z. Naturforsch. **17 a**, 208—216 [1962]; eingegangen am 18. Januar 1962)

Es werden Untersuchungen mit Gitterquelleninterferenzen (KOSSEL-Effekt) an nahezu idealen Kristallen (Ge) mitgeteilt. Die experimentelle Anordnung und die Berücksichtigung der Absorption machen einen Vergleich von Interferenzaufnahmen mit kohärenter (Gitterquelleninterferenzen) und inkohärenter Quellenlage (Weitwinkelinterferenzen) bei verschiedener Tiefenlage der Quelle möglich. Durch die in dieser Arbeit erfolgte Einführung der Absorption in die v. LAUESCHE Theorie der Gitterquelleninterferenzen konnten die Ergebnisse mit den Voraussagen der dynamischen Interferenztheorie verglichen werden. Es ergibt sich, wie am Beispiel der (220)-Interferenz im symmetrischen LAUE-Fall gezeigt wird, in Übereinstimmung mit der Theorie ein Unterschied in bezug auf Intensität und Feinstruktur zwischen Interferenzen mit kohärenter und inkohärenter Quellenlage. Bei größerer Tiefenlage der Quelle kommt es zu einem Umschlag der Feinstruktur der Gitterquelleninterferenzen.

Bei den üblichen Interferenzversuchen mit RÖNTGEN-Strahlen an Kristallen sind die Quelle der RÖNTGEN-Strahlung und der zu untersuchende Kristall räumlich voneinander getrennt. Regt man jedoch, wie KOSSEL u. a.^{2—4}, die Atome des Kristallgitters selbst zur RÖNTGEN-Strahlung an, so ist die Quelle in den Kristall verlegt. Es sollten dann zu den bisher bekannten Interferenzerscheinungen zusätzlich neue auftreten. Da die Quellen der RÖNTGEN-Strahlen mit den Atomen des Kristallgitters zusammenfallen, kann es zu einer Überlagerung der von den Quellen direkt ausgehenden und der an anderen Gitteratomen abgebeugten Strahlung kommen. KOSSEL² zeigte, daß sich der Helldunkel-Effekt der von ihm gefundenen Interferenzlinien mit einer Aufhellung auf ihren konvexen Seiten in diesem Sinne deuten ließ.

Wegen des geringen Abstandes zwischen Quelle und beugendem Atom müßte man theoretisch diese Erscheinung als Interferenz von Kugelwellen betrachten. Mit Hilfe der dynamischen Interferenztheorie und des Reziprozitätstheorems der Optik konnte v. LAUE⁵ jedoch wieder mit ebenen Wellen rechnen. Die von ihm gewonnene Feinstruktur der Interferenzlinie stimmte in bezug auf die Lage der Aufhellung mit der von KOSSEL² gezeigten Hell-dunkel-Struktur überein.

Trotzdem vermutete SEEMANN⁶, daß das Auftreten der Aufhellung auf der konvexen Linienseite die Folge einer „anisotropen Mosaikstruktur“ sei. Die Gitterquelleninterferenzen sollen sich dann auf einfache Weitwinkelinterferenzen, d. h. auf Interferenzen mit inkohärenter Quellenlage zurückführen lassen.

Im folgenden wird gezeigt, daß ein Unterschied zwischen Interferenzen bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage besteht. Zu diesem Zweck werden die KOSSELSCHEN Versuche auf nahezu ideale Kristalle ausgedehnt und die Tiefenlagen der Quellen unter der Strahlaustrittsfläche verändert. Dadurch ergeben sich gegenüber den KOSSELSCHEN Versuchen zwei neue experimentelle Möglichkeiten.

1. Es können die bei verschiedener Tiefenlage der Quelle angefertigten KOSSEL-Aufnahmen mit solchen verglichen werden, die unter sonst gleichen Bedingungen jedoch mit einer Strahlenquelle außerhalb des kohärenten Kristallverbandes hergestellt werden.

2. Es kann bei größerer Tiefenlage der Quelle der Einfluß der Absorption der RÖNTGEN-Strahlen auf die Gitterquelleninterferenzen untersucht werden.

Führt man in die v. LAUESCHE Theorie der Gitterquelleninterferenzen die bisher unberücksichtigte Absorption der RÖNTGEN-Strahlen ein, so sollte eine Entscheidung in der oben gestellten Frage nach

¹ Teilergebnisse vorgetragen auf dem 25. Deutschen Physikertag, Wiesbaden 1960; vgl. Phys. Verhandl. **11**, 158 [1960].

² W. KOSSEL, Erg. exakt. Naturw. **16**, 295 [1937].

³ G. BORRMANN, Ann. Phys., Lpz. **27**, 669 [1936].

⁴ O. BRÜMMER u. W. SCHÜLKE, Z. Naturforsch. **17 a**, 203 [1962], voranstehend.

⁵ M. v. LAUE, Ann. Phys., Lpz. **23**, 373 [1935].

⁶ H. SEEMANN, Phys. Z. **44**, 309 [1943].

einem Unterschied zwischen Interferenzen bei kohärenter Quellenlage und solchen bei inkohärenter Lage der Quelle durch Vergleich von Theorie und Experiment möglich sein.

1. Experimentelles

Die experimentelle Anordnung zeigt in schematischer Darstellung die Abb. 1. In jedem der drei Fälle a, b und c trifft ein auf einen Durchmesser von $\sim 0,1$ mm fokussierter Elektronenstrahl den Kristall (a, b) bzw. im Fall c die unter dem Kristall liegende Antikathodenfolie. Die Untersuchungen wurden in einem RÖNTGEN-Mikroprojektor⁷ durchgeführt. Im Fall der Gitterquelleninterferenzen war an Stelle der Antikathodenfolie der Kristall angebracht.

Die Anordnung a entspricht der von KOSSEL² angegebenen. Die Quellen der Strahlung gehören dem kohärenten Kristallverband an und liegen zwischen 0 und $\sim 1 \mu$, der Eindringtiefe der Elektronen, unter der Strahlausstrittsfläche des Kristalls.

In der Anordnung Abb. 1 b wird mit größerer Tiefenlage der Quellen gearbeitet. Wegen der geringen Eindringtiefe der Elektronen entspricht in Abb. 1 b die Tiefenlage der Quelle unter der Strahlausstrittsfläche etwa der Kristalldicke. Die Quellentiefe kann mit der Kristalldicke verändert werden. Wegen des nahezu idealen Kristallmaterials gehören auch bei größeren Kristalldicken die Quellen dem kohärenten Kristallverband an. Die Abdeckfolie in Abb. 1 b ist von gleicher

Dicke (ca. 10μ) und gleichem Material wie die Antikathodenfolie in Abb. 1 c. Mit Hilfe dieser Folie werden die gleichen Absorptionsverhältnisse wie in Abb. 1 c erzielt.

Die austretende Strahlung wird auf einem Film registriert. Die interessierende Interferenzerscheinung liegt im Film auf Kegelschnitten der sogen. KOSSEL-Kegel. Das sind Kegel, die senkrecht auf der reflektierenden Netzebene stehen und einen Öffnungswinkel von $(\pi - \vartheta)$ besitzen ($\vartheta/2 =$ BRAGGScher Winkel). Auf dem Film wird nur ein Ausschnitt aller möglichen Kegelschnitte, des sogen. vollständigen Reflexsystems, zu sehen sein.

Die Kristalle in der Anordnung 1 c sind mit denen der Abb. 1 b identisch. Die Strahlungsquelle gehört nicht mehr dem kohärenten Kristallverband an, sondern liegt in einer getrennten polykristallinen Antikathodenfolie. Der Kristall steht in direktem Kontakt mit dieser Antikathodenfolie. Sie besteht aus dem gleichen Material wie der Kristall. Alle anderen Aufnahmebedingungen (Spannung, Elektronenstrom und Brennfleckgröße) sind dieselben wie in Abb. 1 b. In diesem Fall hat man es also mit normalen Weitwinkelaufnahmen zu tun. Die Energie der im Bereich des BRAGGSchen Winkels auffallenden RÖNTGEN-Strahlen wird den Kristall in einem Strahlenfächer⁸ durchsetzen. An der Ausstrittsfläche tritt der Zerfall in einen durchgehenden R_0 -Strahl und einen reflektierenden R -Strahl ein. In dem hier vorliegenden Fall werden sich die Intensitäten beider Strahlen wegen des verschwindenden Abstandes zwischen Strahlenquelle und der Strahleintrittsfläche des Kristalls auf dem Film überdecken.

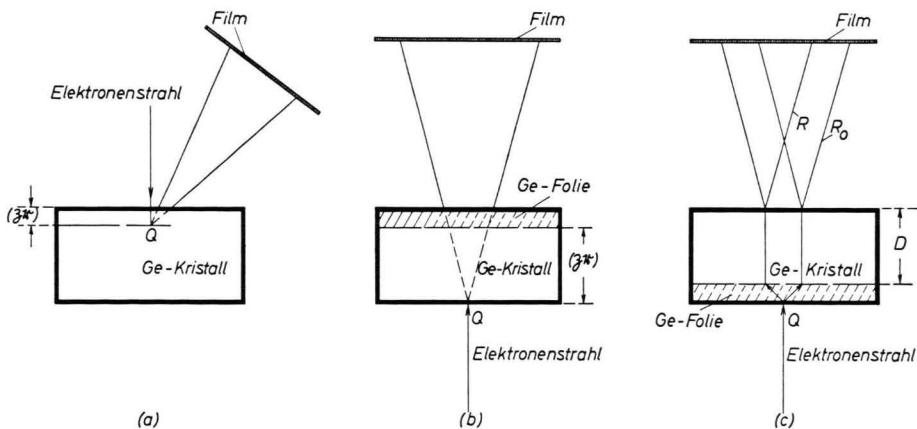


Abb. 1. Experimentelle Anordnung in schematischer Darstellung.

- KOSSELSche Anordnung zur Erregung von Interferenzen bei kohärenter Lage der Quelle Q zum Kristallgitter. Die Quellen liegen zwischen 0 und $\sim 1 \mu$, der Eindringtiefe der Elektronen, unter der Strahlausstrittsfläche.
- Anordnung zur Erzeugung von Interferenzen bei kohärenter Lage der Quellen Q in größerer Tiefe (βr) unter der Strahlausstrittsfläche. Der Kristall ist zur Erzielung gleicher Absorptionsverhältnisse wie in Abb. 1 c, mit einer polykristallinen Ge-Folie abgedeckt.
- Die Quellen liegen in einer besonderen polykristallinen GeFolie und damit inkohärent zum Kristallgitter. Die Trennung der Strahlen R und R_0 ist bewußt übertrieben. D = Kristalldicke.

⁷ O. BRÜMMER, Z. Naturforsch. 15 a, 875 [1960].

⁸ G. BORRMANN, Beiträge zur Physik und Chemie des 20. Jahr-

hunderts, F. Vieweg und Sohn, Braunschweig 1959, S. 262 (dort weitere Literatur).

Als Kristallmaterial diente Ge mit ca. 2000 Versetzungen/cm². Die Kristallplatten mit einer (100)-Oberflächenorientierung (Abweichung $\leq 2^\circ$) wurden nach dem Heraussägen durch Ätzpolieren und einer abschließenden Ätzung in CP 4 auf die angegebene Dicke gebracht.

2. Ergebnisse

Die Abb. 2 * zeigt jeweils nebeneinander die zugehörigen Gitterquelleninterferenz- und Weitwinkelaunahmen bei bestimmter Tiefenlage der Quelle (βr) bzw. Kristalldicke D . Als Beispiel wird die Auswertung der (220)-Interferenz gezeigt. Die Intensität der (220)-Linien der Aufnahmen, die sich im symmetrischen LAUE-Fall befinden, wurden auf einem Zeiss'schen Schnellphotometer ausgemessen. Da die Größe der Untergrundschwärzung in den einzelnen Aufnahmen geringe Schwankungen aufwies, wurden die Photometerregistrierungen auf eine einheitliche Untergrundschwärzung umgerechnet, so daß ein Intensitätsvergleich möglich ist. In allen Fällen lag die Schwärzung innerhalb des Bereiches der Proportionalität zwischen Intensität und Schwärzung, dessen obere Grenze zu $S=0,9$ bestimmt wurde.

Man erkennt auf den Gitterquelleninterferenzaunahmen und den zugehörigen Photometerregistrierungen (Abb. 3) des Intensitätsprofils der (220)-Interferenzlinien einen Umschlag der Helldunkel-Struktur mit abnehmender Tiefenlage der Quelle. Erst von Tiefenlagen $\leq 16 \mu$ an liegt der helle Linienanteil auf der konvexen Linienseite, also zu größeren BRAGGSchen Winkeln hin. Die Helldunkel-Struktur entspricht dann der von KOSSEL² angegebenen Feinstruktur.

Ein Vergleich mit den zugehörigen Interferenzlinien der Weitwinkelaunahmen und ihren Photometerregistrierungen zeigt hier keinen Umschlag der Helldunkel-Struktur. Außerdem ist die Linienintensität bei größeren Kristalldicken bedeutend größer als die Intensität der Gitterquelleninterferenzen bei gleicher Kristalldicke.

Das Experiment ergibt also einen deutlichen Unterschied in bezug auf Intensität und Feinstruktur zwischen Interferenzaunahmen mit kohärenter und inkohärenter Quellenlage.

Es sei darauf hingewiesen, daß bereits BORRMANN⁹ einen Umschlag der Feinstruktur bei Experimenten mit

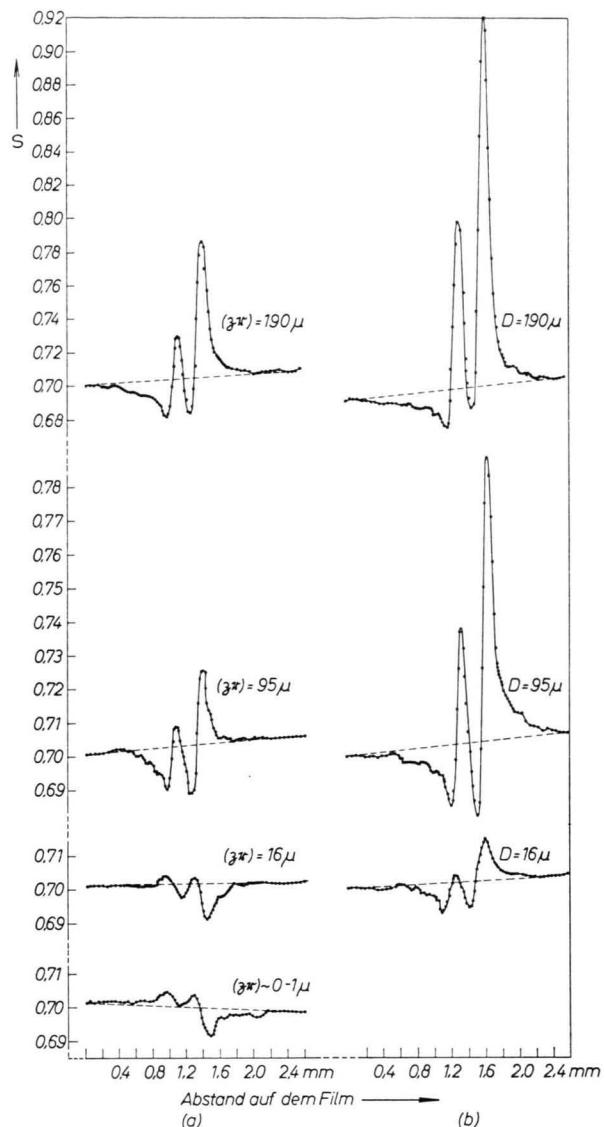


Abb. 3. Photometerregistrierungen der (220)-Interferenzlinie der Abb. 2 (symmetrischer LAUE-Fall). Die Verdoppelung der Maxima bzw. der Minima röhrt von der Dublettaufspaltung der K_α -Linie her. — Spalte a: Interferenzen bei kohärenter Quellenlage (Umschlag der Helldunkel-Struktur!). — Spalte b: Interferenzen bei inkohärenter Quellenlage (kein Umschlag der Feinstruktur — größere Intensität als bei Interferenzen aus kohärenter Quellenlage). Entsprechend große Quellentiefen (βr) bzw. Kristalldicken D liegen in derselben Zeile. Man beachte den veränderten Ordinatenmaßstab bei (βr) bzw. $D=190 \mu$.

Gitterquelleninterferenzen am Fe gefunden hat. Er mußte jedoch offenlassen, ob es sich bei den Interferenzlinien aus größerer Quellentiefe mit einer der KOSSEL-

* Abb. 2 a, b auf Tafel S. 206 b.

⁹ G. BORRMANN, Z. Kristallogr. (a) 100, 228 [1938].

schen entgegengesetzten Feinstruktur noch um Gitterquelleninterferenzen, d. h. um Interferenzen bei Zustrahlung aus Quellen innerhalb des kohärenten Kristallverbandes handelte. Das von BORRMANN verwandte Fe war mit großer Wahrscheinlichkeit ein Kristall, der dem Realtyp näher als dem Idealtyp stand. Die Aufhellungslinie auf der konkaven Linienseite kann dann von der im Realkristall auftretenden Extinktionslinie herrühren, die sich infolge des Strahlenganges im Realkristall bei größerer Kristalldicke nicht mehr vollständig mit der Reflexionslinie überdeckt.

Dasselbe gilt sicher bei den Aufnahmen von WOLF¹⁰ mit der kurzwelligen Kante des Bremsspektrums, die man deshalb wohl nicht mehr als Interferenzauflnahmen aus Gitterquellen bezeichnen kann (siehe auch¹¹).

Im folgenden soll an Hand theoretischer Betrachtungen gezeigt werden, daß der oben genannte Unterschied in der Intensität und Feinstruktur von Interferenzauflnahmen mit kohärenter und inkohärenter Quellenlage durch Interferenzerscheinungen im Innern des Kristalls bedingt ist.

3. Theoretische Berechnungen

v. LAUE⁵ kam bei der theoretischen Deutung der KOSSELSCHEN Gitterquelleninterferenzen ohne die Berücksichtigung der Absorption aus, da die Tiefenlage der Quelle $\sim 1 \mu$ nicht überschritten. Da es sich in den hier vorliegenden Experimenten um Gitterquelleninterferenzen aus größerer Quellentiefe han-

delt, mußte in der theoretischen Darstellung die Absorption der RÖNTGEN-Strahlung mit berücksichtigt werden.

Nach v. LAUE⁵ geht man bei der theoretischen Behandlung der Gitterquelleninterferenzen vom optischen Reziprozitätssatz aus, der hier folgendes besagt:

Fällt eine monochromatische ebene RÖNTGEN-Welle aus einer Strahlenquelle bestimmter Stärke im Aufpunkt P des Außenraumes auf den Kristall, so möge sie im Innern des Kristalls am Ort Q der Gitterquelle eine zu $\mathfrak{D} \mathfrak{D}^*$ proportionale Intensität besitzen. Bringt man nun an den Ort Q eine Gitterquelle derselben Stärke wie die der Quelle im Außenraum, so wird diese dem Punkt P die zu $\mathfrak{D} \mathfrak{D}^*$ proportionale Intensität zustrahlen¹².

Man hat so den gesamten Formalismus der dynamischen Interferenztheorie zur Verfügung, der eine Berechnung der Erregung im Innern des Kristalls auch unter Berücksichtigung der Absorption bei Zustrahlung von außen zuläßt¹³.

Fällt eine ebene RÖNTGEN-Welle¹⁴ unter BRAGG-schem Winkel auf einen Kristall, so entstehen im LAUE-Fall pro Polarisationsrichtung zwei Wellenfelder, jedes einzelne aus der Überlagerung von hindurchgehender und reflektierter Welle. Die elektrische Erregung im Innern des Kristalls ist dann

$$\mathfrak{D} = \exp[-2\pi i \nu t] \left\{ \mathfrak{D}_{01} \exp[-2\pi i(\mathfrak{R}_{01} \mathbf{r})] + \mathfrak{D}_{02} \exp[-2\pi i(\mathfrak{R}_{02} \mathbf{r})] \right. \\ \left. + \exp[-i r_h] (\mathfrak{D}_{h1} \exp[-2\pi i(\mathfrak{R}_{01} \mathbf{r})] + \mathfrak{D}_{h2} \exp[-2\pi i(\mathfrak{R}_{02} \mathbf{r})]) \right\}. \quad (1)$$

In dieser Gleichung und im folgenden bedeuten im einzelnen: $\mathfrak{D}_{01,2}$ Vektor der elektrischen Erregung der hindurchgehenden Welle; $\mathfrak{D}_{h1,2}$ Vektor der elektrischen Erregung der „reflektierten“ Welle; $\mathfrak{R}_{01,2}$ Wellenvektor der hindurchgehenden Welle; 1, 2 Indizes der beiden Wellenfelder; $r_h = 2\pi(b_h \mathbf{r})$, b_h reziproker Gittervektor, \mathbf{r} Ortsvektor im Kristallgitter;

$$\delta_r = -\frac{\chi_{r0}}{2\gamma_0} + \frac{1}{4\gamma_h} \left\{ \beta_r \pm \sqrt{\beta_r + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h} \right\}, \\ \delta_i = -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \chi_{i0} \pm \frac{(1/\gamma_0 - 1/\gamma_h) \beta_r \chi_{i0} + 2C^2 \Psi_h / \gamma_0}{4\sqrt{\beta^2 + 4C^2 \Phi_h \gamma_h / \gamma_0}} \right\} \begin{array}{l} \text{„EWALDSche"} \\ \text{Anpassung“} \end{array}$$

$\chi_{r0}, \chi_{rh}, \chi_{i0}, \chi_{ih}$ FOURIER-Koeffizienten der Gitterfunktion χ :

$$\chi = \chi_r + i\chi_i, \quad \chi_h \chi_{ih} = \Phi_h + i\Psi_h; \quad \gamma_h = \cos \psi_h, \quad \gamma_0 = \cos \psi_0,$$

wobei ψ_h, ψ_0 Winkel zwischen einfallendem bzw. reflektiertem Strahl und dem nach innen gerichteten Lot auf der Kristalloberfläche.

¹⁰ H. C. WOLF, Ann. Phys., Lpz. 13, 381 [1953].

¹¹ O. BRÜMMER, Z. Naturforsch. 13a, 571 [1958].

¹² Nach C. v. FRAGSTEIN, Optik 11, 301 [1954] gilt der optische Reziprozitätssatz auch für die hier vorliegende schwache Absorption.

¹³ M. v. LAUE, Acta Cryst. 2, 106 [1949].

¹⁴ Da man es hier mit einem divergenten Strahlenbündel zu tun hat, muß man sich dieses nach WAGNER¹⁵ aus unendlich vielen miteinander inkohärenten nahezu ebenen Wellen zusammengesetzt denken.

¹⁵ H. WAGNER, Z. Phys. 146, 127 [1956].

$\beta = 2 \alpha - \chi_{r0}(1 - \gamma_h/\gamma_0) - i \chi_{i0}(1 - \gamma_h/\gamma_0)$ mißt den Abstand von der Mitte des Interferenzbereiches;
 $C = |\cos \vartheta|$ wenn \mathfrak{D} senkrecht auf der Einfallsebene steht, $C = 1$ wenn \mathfrak{D} in der Einfallsebene liegt;
 $\tau = 1$ wenn \mathfrak{D} in der Einfallsebene liegt und $\vartheta > \pi/2$, $\tau = 0$ in den anderen Fällen;
 $\vartheta/2$ BRAGGScher Winkel, φ Winkel zwischen Netzebene und Kristalloberfläche;

$$\text{Sin } v = \frac{\beta/C}{2\sqrt{\chi_h} \chi_h \gamma_h / \gamma_0}.$$

Man drückt nun mit Hilfe der Anpassungsgleichungen (Anpassung des äußeren an das innere Wellenfeld) die $\mathfrak{R}_{01,2}$ durch den Wellenvektor $\mathfrak{R}_0^{(a)}$ der äußeren Welle aus:

$$\mathfrak{R}_{01} = \mathfrak{R}_0^{(a)} - (\delta_{r1} + i \delta_{i1}) k \mathfrak{z}, \quad \mathfrak{R}_{02} = \mathfrak{R}_0^{(a)} - (\delta_{r2} + i \delta_{i2}) k \mathfrak{z}. \quad (2)$$

An dieser Stelle findet die Absorption der Wellenfelder Berücksichtigung, da die Imaginärteile $\delta_{i1,2}$ der „EWALDSchen Anpassung“ die Imaginärteile χ_{i0}, χ_{ih} der FOURIER-Koeffizienten von χ enthalten. χ_{ih} ist ein Maß für die Absorptionswahrscheinlichkeit in der Elementarzelle.

Durch Einsetzen von Gl. (2) in (1) erhält man:

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} = & \exp \left[2 \pi i v t - \frac{i}{2} (r_1 + r_2) \right] \exp \left[-\pi k (\delta_{i1} + \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r}) \right] \left\{ \mathfrak{D}_{01} \exp \left[-\frac{i}{2} (r_1 - r_2) - \pi k (\delta_{i1} - \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r}) \right] \right. \\ & \left. + \mathfrak{D}_{02} \exp \left[\frac{i}{2} (r_1 - r_2) + \pi k (\delta_{i1} - \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r}) \right] \right\} \\ & + \exp [-i r_h] \left(\mathfrak{D}_{h1} \exp \left[-\frac{i}{2} (r_1 - r_2) - \pi k (\delta_{i1} - \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r}) \right] + \mathfrak{D}_{h2} \exp \left[\frac{i}{2} (r_1 - r_2) + \pi k (\delta_{i1} - \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r}) \right] \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Dabei bedeuten:

$$r_{1,2} = \pi (\mathfrak{R}_0^{(a)} - k \delta_{r1,2} \mathfrak{z}) \mathfrak{r}.$$

Man führt aus den Grenzbedingungen beim Eintritt und Austritt der Strahlung folgende Beziehungen ein:

$$\begin{aligned} |\mathfrak{D}_{01}| &= \frac{e^{-v}}{2 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} v} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|; \quad |\mathfrak{D}_{02}| = \frac{e^{+v}}{2 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} v} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|; \\ |\mathfrak{D}_{h1}| &= -\frac{(-1)^{\tau}}{2 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} v} \left(\frac{\chi_h}{\chi_h} \right)^{1/2} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|; \quad |\mathfrak{D}_{h2}| = -\frac{+(-1)^{\tau}}{2 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} v} \left(\frac{\chi_h}{\chi_h} \right)^{1/2} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|. \end{aligned} \quad (4)$$

Man setzt die Gl. (4) in (3) ein und bildet

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} \mathfrak{D}^* = & \frac{\exp[-2 \pi k (\delta_{i1} + \delta_{i2}) (\mathfrak{z} \mathfrak{r})]}{4 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f}^2 v} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \left\{ 2 \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} [2 v_r + \frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2) (\mathfrak{z} \mathfrak{r})] + 2 \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right) \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f} [\frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2) (\mathfrak{z} \mathfrak{r})] \right\} \left| \frac{\chi_h}{\chi_h} \right| \\ & + 2 \cos[2 v_i + 2(r_1 - r_2)] - 2 \left| \frac{\chi_h}{\chi_h} \right| \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right) \cos[2(r_1 - r_2)] \\ & + 4(-1)^{\tau} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} \cos[v_i] \cos[r_h - \eta_h] \mathfrak{S} \text{in}[v_r + \frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2) (\mathfrak{z} \mathfrak{r})] \\ & + 4(-1)^{\tau} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} \sin[v_i] \sin[r_h - \eta_h] \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f}[v_r + \frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2) (\mathfrak{z} \mathfrak{r})] \\ & - 4(-1)^{\tau} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} \cos[v_i] (\mathfrak{S} \text{in}[v_r] \cos[2(r_1 - r_2)] \cos[r_h - \eta_h] - \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f}[v_r] \sin[2(r_1 - r_2)] \sin[r_h - \eta_h]) \\ & + 4(-1)^{\tau} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} \sin[v_i] (\mathfrak{S} \text{in}[v_r] \sin[2(r_1 - r_2)] \cos[r_h - \eta_h] + \mathfrak{C} \mathfrak{o} \mathfrak{f}[v_r] \cos[2(r_1 - r_2)] \sin[r_h - \eta_h]). \end{aligned} \quad (5)$$

Dabei bedeuten: $\frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2) = 2 \pi k (\delta_{i1} - \delta_{i2})$ und $2 \pi k (\delta_{i1} + \delta_{i2}) = \mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right]^{-1}$,

wo μ = normaler Absorptionskoeffizient und η_h = das Azimut der komplexen Größe χ_h .

Man erhält so einen Ausdruck für das Amplitudenquadrat am Ort der Gitterquelle unter Berücksichtigung der Absorption und damit nach dem Reziprozitätssatz die Intensität, die die Gitterquelle am Ort $(\mathfrak{z} \mathfrak{r})$

unter der Kristalloberfläche in den Außenraum strahlt. Eine Analyse dieser Gl. (5) zeigt auch rechnerisch den Unterschied der Intensität und Feinstruktur zwischen kohärenter und inkohärenter Lage der Quelle. Die ersten 4 Glieder in der { } Klammer der Gl. (5) geben, wie ein Vergleich mit Gl. (38) in¹³ zeigt, die Intensität ($|\mathfrak{D}_0^{(d)}|^2 + |\mathfrak{D}_h^{(d)}|^2$) des durchgehenden R_0 - und des reflektierten R-Strahles an, die nach Zerfall des Wellenfeldes bei inkohärenter Quellenlage im LAUE-Fall entstehen. Dabei ist nur ($\mathfrak{z} \mathfrak{r}$) durch D , die Dicke des Kristalls, zu ersetzen. Es gilt nämlich nach v. LAUE¹³

$$|\mathfrak{D}_0^{(d)}|^2 = \frac{\exp[-2\pi k D(\delta_{11} + \delta_{12})]}{4 \mathfrak{C} \mathfrak{f}^2 v} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \{2 \mathfrak{C} \mathfrak{f} [2v_r + \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] + 2 \cos[2\pi k(\delta_{r1} - \delta_{r2})D - 2v_i]\}, \quad (6)$$

$$|\mathfrak{D}_h^{(d)}|^2 = \frac{\exp[-2\pi k D(\delta_{11} + \delta_{12})]}{4 \mathfrak{C} \mathfrak{f}^2 v} |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \{2 \mathfrak{C} \mathfrak{f} [\frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) D] - 2(\gamma_0/\gamma_h) \cos[2\pi k(\delta_{r1} - \delta_{r2})D]\} |\chi_h/\chi_{hr}|.$$

Der oben genannte Unterschied wird also durch die restlichen Glieder in Gl. (5) angegeben, die ihrer Herkunft nach aus Gliedern mit $|\mathfrak{D}_{01,2}|$ $|\mathfrak{D}_{h1,2}|$ als Faktoren entstanden sind.

Aus Gl. (5) wurde das Intensitätsprofil der (220)-Linie im symmetrischen LAUE-Fall für den Fall kohärenter und inkohärenter Quellenlage errechnet – und zwar für die im Experiment vorliegenden Tiefenlagen der Quellen bzw. Dicken des Kristalls. Zu diesem Zweck wurde

$$\frac{\mathfrak{D} \mathfrak{D}^* - |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu(\mathfrak{z} \mathfrak{r})/\gamma_0\}}{|\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu(\mathfrak{z} \mathfrak{r})/\gamma_0\}} = R_{\text{koh.}}$$

bzw.

$$\frac{|\mathfrak{D}_0^{(d)}|^2 + |\mathfrak{D}_h^{(d)}|^2 - |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu D/\gamma_0\}}{|\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu D/\gamma_0\}} = R_{\text{inkoh.}}$$

gegen $\sin v_r$ aufgetragen (siehe Abb. 4). Dabei wurden folgende Vernachlässigungen getroffen: $\cos v_i$ wurde gleich 1 und $\sin v_i$ gleich 0 gesetzt, da $v_i \ll 1$ auch bei großen β . Deshalb konnte auch $\mathfrak{C} \mathfrak{f}^2 v$ ersetzt werden durch $\mathfrak{C} \mathfrak{f}^2 v_r$. Es ist in guter Näherung

$$(\chi_h/\chi_{hr})^{1/2} \approx (\chi_{hr}/\chi_{hr})^{1/2}, \quad \text{da } |\chi_{hi}/\chi_{hr}| \approx 10^{-2}.$$

Glieder mit den Faktoren $\frac{\sin}{\cos} [2(r_1 - r_2)]$ bzw. $\cos[2v_i + 2(r_1 - r_2)]$ blieben in der Rechnung unberücksichtigt. Bei kohärenter Quellenlage ergeben sie eine periodische Schwankung der Intensität mit der Periode der „EWALDSchen Pendellösung“. Die Periodenlänge liegt jedoch in der Größenordnung der Eindringtiefe der Elektronen, so daß sich die Wirkung dieser Glieder auf die Intensität herausmittelt. Bei inkohärenter Quellenlage heben sich diese Glieder im symmetrischen LAUE-Fall ($\gamma_0 = \gamma_h$) und wegen der verschwindend kleinen v_i sowieso fort.

Die Größe $|\chi_{hi}/\chi_{oi}|$ für den (220)-Reflex des Ge wurde einer Arbeit von HUNTER¹⁶ zu 0,96 entnom-

men. Dabei wurde χ_{oi} aus dem zu $\mu = 235 \text{ cm}^{-1}$ bestimmten normalen Absorptionskoeffizienten des Ge mit $\text{Ge K}_{\alpha 1}$ -Strahlung berechnet. χ_{hr} ergab sich aus den angegebenen Werten¹⁷ für die Atomformamplitude und dem bekannten Strukturfaktor des Ge-Gitters. Für den Polarisationsfaktor C wurde in den Rechnungen $C = \frac{1}{2}(1 + \cos \vartheta)$ eingesetzt.

4. Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den theoretischen Rechnungen

Ein Vergleich der in Abb. 4 zusammengestellten theoretisch berechneten Reflexionskurven bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage mit den experimentell gewonnenen (Abb. 3) zeigt, daß sie in bezug auf die Lage der Feinstruktur und den Intensitätsunterschied zwischen Gitterquellen- und Weitwinkellinien qualitativ übereinstimmen. Eine genaue Übereinstimmung der Kurvenform und des Verhältnisses der *Maximalintensitäten* verschiedener Linien zwischen Theorie und Experiment ist aus folgenden Gründen nicht zu erwarten:

Einmal wird der Untergrund der Aufnahmen durch die unvermeidliche Bremsstrahlung angehoben, deren Intensitäts- und Wellenlängenverteilung noch zusätzlich von der Kristalldicke abhängen. Dadurch wird ein Vergleich der Intensitäten von Aufnahmen verschiedener Kristalldicken bzw. Quellentiefen unmöglich, da die Intensitätsmessungen auf diesen Untergrund bezogen werden müssen. Zum anderen führt der endliche Brennfleckdurchmesser und die endliche Wellenlängenbreite der K_{α} -Linie zusammen mit ihrer Dublettsstruktur zu einer Linienverbreiterung bzw. Linienaufspaltung. Darüber hinaus wird bei inkohärenter Quellenlage wegen der endlichen Dicke der Antikathodenfolie die Überlagerung der R- und R_0 -Strahlen nicht ganz vollkommen

¹⁶ L. P. HUNTER, Proc. K. Ned. Akad. Wet. B **61**, 214 [1958].

¹⁷ L. H. THOMOS u. K. UMEDA, J. Chem. Phys. **26**, 293 [1957].

sein, wie es in den theoretischen Kurven vorausgesetzt wurde.

Um trotzdem einen quantitativen Vergleich zwischen Theorie und Experiment zu ermöglichen, wurde der Flächeninhalt unter den experimentellen Reflexionskurven bestimmt, und zwar so, daß der

Flächeninhalt des Kurventeils über der Untergrundschwärzung (gestrichelte Linie in Abb. 3) positiv und der des Kurventeils unter der Untergrundschwärzung negativ gezählt wurde.

Um die so gewonnene „integrale Intensität“ (I_{exp}) mit den theoretischen Berechnungen vergleichen zu können, wurden die Integrale

$$I_{\text{theor. koh.}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathfrak{D} \mathfrak{D}^* - |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu(\delta r)/\gamma_0\}}{|\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu(\delta r)/\gamma_0\}} d\beta_r$$

für den Fall kohärenter Quellenlage bzw.

$$I_{\text{theor. inkoh.}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\mathfrak{D}_0^{(d)}|^2 + |\mathfrak{D}_h^{(d)}|^2 - |\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu D/\gamma_0\}}{|\mathfrak{D}_0^{(a)}|^2 \exp\{-\mu D/\gamma_0\}} d\beta_r$$

für den Fall inkohärenter Quellenlage ausgewertet. Dabei wurden im Bereich $\sin v_r > 100$ für $\mathfrak{D} \mathfrak{D}^*$ bzw. ($|\mathfrak{D}_0^{(d)}|^2 + |\mathfrak{D}_h^{(d)}|^2$) die Werte eingesetzt, die sich aus der Theorie unter Vernachlässigung der Absorption ergeben. Der störende Einfluß der Bremsstrahlung im Untergrund der Aufnahmen beim Intensitätsvergleich verschwindet, wenn man für die einzelnen Kristalldicken bzw. Tiefenlagen der Quelle das Verhältnis der integralen Intensitäten bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage

$$I_{\text{exp. koh.}}/I_{\text{exp. inkoh.}}$$

bildet. Die so gewonnenen Werte stimmen innerhalb der Fehlergrenzen mit den auf gleiche Weise berechneten theoretischen Werten

$$I_{\text{theor. koh.}}/I_{\text{theor. inkoh.}}$$

sowohl dem Vorzeichen, als auch dem absoluten Betrage nach überein (siehe Tab. 1).

5. Deutung der Ergebnisse

Man kann den hier experimentell in Übereinstimmung mit der Theorie nachgewiesenen Unterschied zwischen Interferenzen bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage mit Hilfe der Vorstellung von Wellenfeldern im Kristall deuten:

a) Bei Zustrahlung aus Quellen, die *inkohärent* zum Gitter liegen, entstehen im Innern des Kristalls durch Überlagerung von reflektierten und hindurchgehenden Wellen Wellenfelder, die allerdings an der Rückseite des Kristalls wieder in reflektierte und durchgehende Strahlen zerfallen. Dadurch kommt es bei der hier beschriebenen Anordnung (siehe

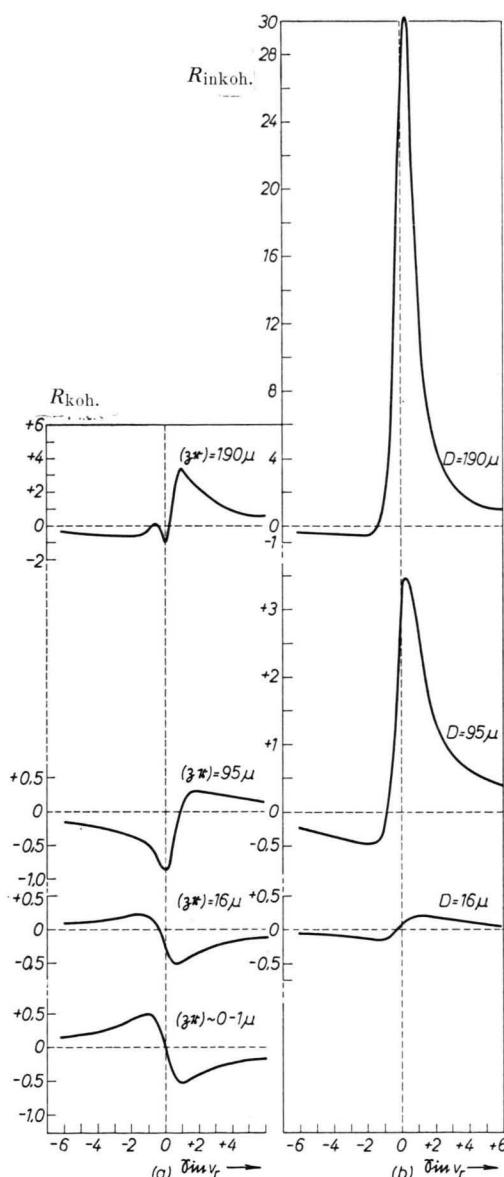


Abb. 4. Theoretische Reflexionskurven der (220)-Interferenzlinie (symmetrischer LAUE-Fall) von Ge mit $\text{Ge } K_{\alpha 1}$. — Spalte a: Reflexionskurven bei kohärenter Quellenlage (Umschlag der Helldunkel-Struktur). — Spalte b: Reflexionskurven bei inkohärenter Quellenlage (kein Umschlag der Feinstruktur — größere Intensität als bei Interferenzen aus kohärenter Quellenlage). Geänderter Ordinatenmaßstab bei (δr) bzw. $D=190 \mu$.

D bzw. (\AA) in μ	$I_{\text{exp. koh.}} \cdot 10^5$	$I_{\text{exp. inkoh.}} \cdot 10^5$	$I_{\text{theor koh}} \cdot 10^5$	$I_{\text{theor. inkoh.}} \cdot 10^5$	$\frac{I_{\text{exp. koh.}}}{I_{\text{exp. inkoh.}}}$	$\frac{I_{\text{theor. koh.}}}{I_{\text{theor. inkoh.}}}$
0–1	$-0,7 \pm 2,0^*$	—	0,0	—	—	—
16	— 7,7	+ 1,5	— 8,7	+ 1,74	— 5,1 (\pm) 3,0	— 4,97
95	— 7,7	+ 57,4	— 12,3	+ 74,3	— 0,132 \pm 0,040	— 0,165
190	+ 36,4	+ 199,5	+ 102,7	+ 583,0	+ 0,182 \pm 0,012	+ 0,176

* Diese Fehlerangabe gilt für alle Werte von $I_{\text{exp.}}$.

Tab. 1.

Abb. 1) bei Zustrahlung aus inkohärenter Quellenlage zu einer einfachen Addition der Intensitäten dieser beiden Strahlen auf dem Film.

b) Nach dem Reziprozitätssatz strahlt jedoch eine *kohärente* zum Gitter liegende Quelle mit einer Intensität in den Außenraum, die dem Amplitudenquadrat $\mathfrak{D} \mathfrak{D}^*$ der oben genannten Wellenfelder am Ort der strahlenden Atome proportional ist. Gl. (5) zeigt aber, daß $\mathfrak{D} \mathfrak{D}^*$ von der Summe der Amplitudenquadrate der durchgehenden $\mathfrak{D}_{01,2}$ und reflektierten Wellen $\mathfrak{D}_{h1,2}$ abweicht. Deshalb besitzen Interferenzen bei *kohärenter* Quellenlage grundsätzlich eine andere Intensität (und evtl. Feinstruktur) als Interferenzen bei *inkohärenter* Quellenlage.

Der unter a) und b) aufgeführte Unterschied hat seine Ursache in der Überlagerung der Wellen $\mathfrak{D}_{01,2}$ und $\mathfrak{D}_{h1,2}$ im Kristallinneren. Das Amplitudenquadrat der auf diese Weise entstehenden Wellenfelder am Ort der Atome hängt von dem Phasenunterschied und dem Verhältnis der Beträge der $\mathfrak{D}_{01,2}$ und $\mathfrak{D}_{h1,2}$ ab. Das führt im LAUE-Fall der Interferenzen einmal dazu, daß das eine Wellenfeld I Maxima der elektrischen Erregung am Ort der Atome der reflektierenden Netzebenen besitzt, während das andere Wellenfeld II dort gerade Minima aufweist. Zum anderen wird das eine Wellenfeld deshalb mehr im Bereich kleinerer, das andere mehr im Bereich größerer BRAGGScher Winkel innerhalb des Reflexionsbereiches angeregt.

Im einzelnen kann nun aus dieser Vorstellung erstens der Intensitätsunterschied zwischen Interferenzen bei *kohärenter* und *inkohärenter* Quellenlage und großer Kristalldicke bzw. Quellentiefe und zweitens der Umschlag der Feinstruktur der Interferenzen bei *kohärenter* Quellenlage einer anschaulichen Deutung zugeführt werden:

Zu 1. Da das Wellenfeld I mit den Maxima am Ort der Atome bei größerer Kristalldicke schließlich fast völlig durch Absorption verschwindet, ist in größerer Tiefe praktisch nur noch das Wellenfeld II wirksam. Dieses Wellenfeld liefert zwar nach Zerfall

bei *inkohärenter* Quellenlage wegen seiner anomal kleinen Absorption viel Intensität in den reflektierten und hindurchgehenden Strahl (BORRMANN-Effekt). Dasselbe Wellenfeld wird jedoch am Ort der Atome nur relativ geringe Intensität besitzen. Bei *kohärenter* Quellenlage wird demzufolge nach dem Reziprozitätssatz aus der der Kristalldicke entsprechenden Tiefe nur relativ geringe Intensität in den Außenraum gestrahlt.

Während also BORRMANN⁶ die Konsequenzen der Bildung von Wellenfeldern in Absorption beobachtete, ist es hier möglich, sie auch in Emission bei verschiedener Quellentiefe zu verfolgen.

Zu 2. Durch die Bildung von Wellenfeldern bei Zustrahlung innerhalb des Reflexionsbereiches herrscht am Ort der Gitteratome eine vom Einfallswinkel innerhalb dieses Bereiches abhängige Erregung [Gl. (5)]. Das Amplitudenquadrat der Erregung am Ort der Atome dicht unter der Kristalloberfläche wird bevorzugt von *dem* Wellenfeld geliefert, dessen Schwingungsmaxima in die Netzebenen dieser Gitteratome fallen. Dieses Wellenfeld wird hauptsächlich im Gebiet kleinerer Winkel innerhalb des Reflexionsbereiches angeregt. Man erhält deshalb nach dem Reziprozitätssatz im Fall *kohärenter* Quellenlage eine Feinstruktur der Emission mit einer Aufhellung auf der konvexen Seite der KOSSEL-Linie (zu größeren BRAGGSchen Winkeln hin). Betrachtet man jedoch Gitteratome in größerer Tiefe unter der Kristalloberfläche, so wird gerade dieses eben genannte Wellenfeld mit den Maxima der Schwingung in den Netzebenen auch besonders stark durch Absorption geschwächt. Schließlich ist praktisch nur noch das Wellenfeld mit den Minima in den Atomschwerpunkten am Amplitudenquadrat am Ort der Atome beteiligt. Dieses Wellenfeld wird hauptsächlich im Gebiet größerer Winkel innerhalb des Reflexionsbereiches angeregt. Es ergibt sich deshalb bei größerer Tiefe der *kohärenten* Quellen eine Feinstruktur der Emission mit der Aufhellung auf der konkaven Seite der KOSSEL-Linie.

6. Zusammenfassung

Es wird eine Anordnung beschrieben, die einen Vergleich der Interferenzerscheinung bei kohärenter und inkohärenter Lage der RÖNTGEN-Strahlquelle in bezug auf den Kristall gestattet. Die Tiefenlage der Quelle unter der Strahlaustrittsfläche kann verändert werden. Die Auswertung der (220)-Interferenzen an nahezu idealen Ge (ca. 2000 Versetzungen/cm²) ergab zwischen Interferenzen bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage folgende Unterschiede:

a) Bei kohärenter Quellenlage tritt bei zunehmender Tiefenlage der Quelle ein Umschlag der von KOSSEL beschriebenen Feinstruktur (Helldunkelstruktur) der Interferenzlinie ein.

b) Bei inkohärenter Quellenlage bleibt ein solcher Umschlag aus. Die Feinstruktur ist derjenigen

bei kohärenter Quellenlage und geringer Quellentiefe entgegengesetzt.

c) Die Intensität der Interferenzen ist bei inkohärenter Quellenlage und größerer Kristalldicke bedeutend größer als bei kohärenter Quellenlage in der dieser Kristalldicke entsprechenden Tiefe.

Durch Einführung der Absorption in die v. LAU- sche Theorie der Gitterquelleninterferenzen war ein Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den theoretisch zu erwartenden Interferenzkurven möglich. Es zeigte sich eine Übereinstimmung des Verhältnisses der experimentell bestimmten integralen Intensitäten bei kohärenter und inkohärenter Quellenlage mit dem theoretisch berechneten Verhältnis innerhalb der Fehlergrenzen.

Herrn Prof. Dr. W. MESSERSCHMIDT danken wir für das dieser Arbeit entgegengebrachte fördernde Interesse.

Zur Gittertheorie der piezoelektrischen und elastischen Eigenschaften von Kristallen mit Zinkblendestruktur unter Berücksichtigung der elektronischen Polarisation

II. Darstellung der piezoelektrischen Konstante e_{14} durch mikroskopische Parameter für das Modell einer reinen Feldpolarisation und für das Hüllen-Modell

Von LUDWIG MERTEN

Aus der OSRAM-Studiengesellschaft, Augsburg
(Z. Naturforsch. 17 a, 216—227 [1962]; eingegangen am 24. Dezember 1961)

Die im ersten Teil erhaltenen allgemeinen Beziehungen werden im folgenden spezialisiert für konkrete, die elektronische Polarisation beschreibende Modelle. Von den nach Teil I durch die elektronische Polarisation beeinflußten makroskopischen Konstanten wird hier die besonders interessierende piezoelektrische Konstante e_{14} im einzelnen untersucht, insbesondere, weil anzunehmen ist, daß die nach früheren Arbeiten erhaltenen noch relativ großen Diskrepanzen gegenüber dem experimentellen Wert in der Hauptsache auf dem nicht oder nur ungenügend berücksichtigten Einfluß der elektronischen Polarisation beruhen.

Zunächst wird das einfache Modell zugrunde gelegt, daß die Polarisation der Ionen allein durch das mit den Gitterschwingungen verknüpfte makroskopische elektrische Feld verursacht wird. Die sich für ZnS ergebende piezoelektrische Konstante e_{14} ist aber hiernach um einen Faktor 7 bzw. 8 zu groß.

Nach dem Hüllen-Modell nach DICK, OVERHAUSER und COCHRAN werden die Ionen bei ihrer Auslenkung aber auch durch die nicht-COULOMBSchen Kräfte vor allem der nächsten Nachbarn polarisiert. Bei der numerischen Auswertung der für dieses Modell erhaltenen Gleichung zeigt sich, daß die Werte von e_{14} für verschiedene Hüllenladungen des Anions in den meisten Fällen nur noch um ungefähr einen Faktor 2 bis 3 zu groß sind und auch der experimentelle Wert angenommen wird, und zwar für Hüllenladungen, die nach dem Vergleich mit anderen Untersuchungen als ganz vernünftig anzusehen sind. Insbesondere zeigt sich aber auch, daß e_{14} ganz empfindlich von einigen Parametern abhängt. Aus diesem Grunde und wegen der noch ungenauen Kenntnis der Eingangsdaten lassen sich allerdings über die Genauigkeit, mit der e_{14} durch die erhaltenen Formeln dargestellt wird, erst endgültige Aussagen machen, wenn die Eingangsdaten genau bekannt sind.

Wie bereits in Teil I * erwähnt wurde, ist anzunehmen, daß die in den bisherigen Arbeiten erhaltenen, noch relativ großen Diskrepanzen zwischen den Wer-

ten von e_{14} , die aus den Modellvorstellungen berechnet wurden, und dem experimentellen Wert in der Hauptsache darauf beruhen, daß der Einfluß der elektronischen Polarisation nicht oder nur ungenügend im Modell berücksichtigt wurde.

* L. MERTEN, Z. Naturforsch. 17 a, 174 [1962].