

Die einfachsten Eigenfunktionen  $\psi_{\lambda L M \sigma \Omega}$  von  $\Sigma^{(0)} = \hbar \sigma$  sind

$\lambda$	$L$	$\sigma$	$\psi_{\sigma} = \sum_{l_1 l_2} a_{l_1 l_2}^{\sigma} \cdot \psi_{l_1 l_2}$
0	0	0	$\psi_{00}$
1	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{01} \mp i \psi_{10})$
2	0	$\pm 2$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{00} \pm i \psi_{11})$
	1	0	$\psi_{11}$
	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{02} + \psi_{20})$
		$\pm 2$	$\frac{1}{2} (\psi_{02} - \psi_{20}) \mp i \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{11}$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{01} - \sqrt{2} \psi_{21}) \pm i \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{10} + \sqrt{2} \psi_{12})$
		$\pm 3$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} \psi_{01} + \psi_{21}) \mp i \frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} \psi_{10} - \psi_{12})$
	2	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{21} \pm i \psi_{12})$
	3	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\sqrt{3} \psi_{03} + \psi_{21}) \mp i \frac{1}{\sqrt{8}} (\sqrt{3} \psi_{30} + \psi_{12})$
		$\pm 3$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\psi_{03} - \sqrt{3} \psi_{21}) \pm i \frac{1}{\sqrt{8}} (\psi_{30} - \sqrt{3} \psi_{12})$

Wegen  $\Sigma^{(0)} \psi_{\sigma} = \hbar \sigma \psi_{\sigma}$  transformieren sich die neuen Funktionen bei k. D. gemäß

$$\psi_{\lambda L M \sigma \Omega}' = \exp \{ \beta'' (i/\hbar) \Sigma^{(0)} \} \psi_{\lambda L M \sigma \Omega} = \exp \{ i \sigma \beta'' \} \psi_{\lambda L M \sigma \Omega}. \quad (8)$$

Haben die drei Teilchen gleiche Masse, so wird für eine zyklische Teilchenvertauschung  $\beta'' = 2\pi/3$ . Alle Funktionen mit  $\sigma = 3\nu$ ,  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  bleiben daher ungeändert. Nimmt man die ungeraden Permutationen  $\eta^1 = -\xi^1$ ,  $\eta^2 = \xi^2$  hinzu, so sind die symmetrischen Eigenfunktionen für  $\nu \neq 0$

$$\psi_{\lambda L M |\sigma| \Omega}^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda L M \sigma \Omega} + \psi_{\lambda L M -\sigma \Omega}) \quad (9a)$$

und die antimetrischen Funktionen

$$\psi_{\lambda L M |\sigma| \Omega}^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda L M \sigma \Omega} - \psi_{\lambda L M -\sigma \Omega}). \quad (9b)$$

Die neu eingeführten Funktionen haben den Vorteil, daß sie nur die physikalisch sinnvollen Erhaltungsgrößen des Systems ohne die Auszeichnung eines Teilchens enthalten. Die zugehörige Energie-Winkelkorrelation läßt sich in einem verallgemeinerten DALITZ-Diagramm <sup>4</sup> veranschaulichen.

Herrn Doz. Dr. D. KAMKE danke ich für anregende Diskussionen zu dieser Arbeit.

<sup>4</sup> D. DEHNHARD, D. KAMKE u. P. KRAMER, Physics Letters **3**, 52 [1962].

## Mehrfachkontraste an Versetzungen in Glimmer

Von J. DEMNY

Physikalisches Laboratorium Mosbach <sup>1</sup>

(Z. Naturforsch. **18a**, 261–262 [1963]; eingegangen am 18. Januar 1963)

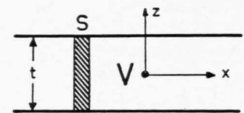
Die Anwendung der kinematischen Theorie der Elektronenbeugung auf die Kontrastercheinungen an Versetzungen wurde von HIRSCH, HOWIE und WHELAN <sup>2</sup> gegeben. Man zerlegt dabei die Kristallfolie in „Säulen“ S (Abb. 1) von atomarem Durchmesser und der Höhe  $t$  ( $t$ : Foliendicke) und addiert die von den einzelnen Säulenelementen (Elementarzellen) reflektierten Elektronenwellen unter Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Phasenverschiebung. Die Welle, die die Säule an der Unterseite der ungestörten Kristallfolie verläßt, hat dort – bis auf einen Faktor – die Amplitude

$$A \sim \sum_j \exp[2\pi i (g + s) \beta_j]. \quad (1)$$

Die Gittervektoren  $\beta_j$  geben die Lage der einzelnen Elementarzellen in der Säule an.  $g$  ist der reziproke Gittervektor des zugehörigen BRAGG-Reflexes und  $s$  ein

kleiner Vektor parallel zur Foliennormale, der die Abweichung des reziproken Gitterpunktes von der EWALD-Kugel angibt.

Abb. 1. Schnitt durch einen dünnen Kristall mit Versetzungslinie V.



Da  $g \beta_j$  ganzzahlig ist, wird aus (1)

$$A \sim \sum_j \exp(2\pi i s z_j). \quad (2)$$

Die Amplitude (2) kann graphisch durch das Amplituden-Phasen-Diagramm ermittelt werden. Es stellt in der kinematischen Theorie für einen ungestörten Kristall einen Kreis vom Radius  $r = s^{-1}$  dar.

Verläuft nun eine Versetzung V parallel zur Oberfläche durch den Kristall (Abb. 1), so werden die Elementarzellen der Säule um einen Vektor  $\mathfrak{R}(z)$  ein wenig verschoben. Für eine reine Schraubenversetzung gilt dann nach <sup>2</sup>

$$A \sim \sum \exp(in \arctg z/x) \exp(2\pi i s z). \quad (3)$$

<sup>1</sup> Angeschlossen der Arbeitsgemeinschaft Industrieller Forschungsvereinigungen (V. 87/63).

<sup>2</sup> P. B. HIRSCH, A. HOWIE u. M. J. WHELAN, Phil. Trans. Roy. Soc. **252**, 499 [1960].



Hier bedeutet  $x$  den Abstand der Säule, über die summiert wird, von der Versetzungslinie;  $n=g \cdot b$  ( $b$ =BURGERS-Vektor der Versetzung).

Die Autoren<sup>2</sup> leiten aus der Integraldarstellung von (3) eine Näherungslösung für  $A$  als Funktion von  $x$  ab. Sie erhalten so für verschiedene  $n$  verschiedene Kontrastprofile  $I=A^2(x)$  einer Versetzung, die mit Beobachtungen an Versetzungen im allgemeinen gut übereinstimmen.

An Versetzungen in dünnen Glimmerschichten wurden jedoch Kontrastercheinungen gefunden, die mit den errechneten Kontrastprofilen in<sup>2</sup> nicht übereinstimmen. Die Abb. 2 a–d\* zeigen die Dunkelfeldaufnahmen verschiedener Reflexe  $g$  an einer Reihe gleicher, paralleler Versetzungen mit dem BURGERS-Vektor  $b=\frac{1}{2}[110]$ . Der Verlauf der Versetzungslinien ist außerhalb der Reflexe zum Teil punktiert eingezeichnet. Sie zeigen im (110)-Reflex den bekannten Kontrast. Darüber hinaus treten in den anderen Reflexen noch zusätzlich Intensitätsmaxima auf, und zwar im (130)-Reflex ein Maximum, im (330)-Reflex zwei Maxima und im (260)-Reflex drei Maxima. Aus Abb. 2 a–d und zahlreichen anderen Bildern leitet man folgende Regel her: Die Zahl  $M$  der zusätzlich auftretenden Maxima ist um eins geringer als die ganze Zahl  $n=g \cdot b$ .

Zur Erklärung der beschriebenen Erscheinungen kann das Amplituden-Phasen-Diagramm der kinematischen Theorie herangezogen werden. Die kinematische Theorie gilt allerdings nur für  $s \neq 0$ , d. h. sie gilt nicht, wenn der Kristall genau in Reflexstellung ist ( $s=0$ ). Da die Kontraste jedoch im Reflex selbst am deutlichsten sind, wurde für  $s$  der Wert  $\bar{s}$  der dynamischen Theorie übernommen. Es gilt nämlich

$$\bar{s} = \sqrt{s^2 + 1/t_0^2}, \quad (4)$$

wobei  $t_0$  die Extinktionstiefe des betreffenden Materials ist. Für  $s=0$  gilt  $\bar{s}=t_0^{-1}$ . Da Glimmer vorwiegend aus Silicium und Sauerstoff besteht, ist  $t_0$  relativ groß. Es wurde für  $n=2$   $t_0=2000 \text{ \AA}$  und für  $n=4$   $t_0=4000 \text{ \AA}$  gesetzt. Die Dicke der Glimmerfolie beträgt ungefähr  $600 \text{ \AA}$ . Legt man in Abb. 1 den Koordinatenanfang in die Versetzungslinie, die in der Mitte der Folie senkrecht zur Zeichenebene verlaufen soll, so variiert  $z$  von  $-300 \text{ \AA}$  bis  $+300 \text{ \AA}$ . Für eine genügende Anzahl  $z$ -Werte dieses Intervalles berechnet man die Phasenwinkel

$$\varphi = n \arctg z/x + 2\pi \bar{s} z. \quad (5)$$

Die graphische Summation (3) liefert die Amplitude und damit die Intensität  $I=A^2$  für ein bestimmtes  $x$  und  $n$ , d. h. die Amplitude und die Intensität der gestreuten Elektronenwelle in der Entfernung  $x$  von der Versetzungslinie. Ändert man  $x$ , so erhält man die Intensitätsverteilung im Dunkelfeld  $A^2(x)$  rechts und links der Versetzung. Die Abb. 3 a und 3 b zeigen die auf diese Weise erhaltenen Kurven  $I(x)$  für  $n=2$  und  $n=4$ . Wegen der Wahl von  $s=0$  geben sie die Kontrastprofile der Versetzung entlang der Mitte der Re-

flexe wieder. In der Umgebung der Versetzung haben die Kurven ein bzw. drei Maxima in Übereinstimmung mit Abb. 2 b und 2 d. Die Intensität der reflektierten Elektronenwelle in den einzelnen Maxima ist – visuell beurteilt – mit der Intensität im Reflex selbst weit entfernt von der Versetzungslinie vergleichbar, was auch die errechneten Kurven im wesentlichen zeigen (Intensität des Reflexes gestrichelt eingezeichnet). Ferner ersieht man aus den Kurven, daß ein Maximum (für  $n=4$  das mittlere) bei  $x=0$  erscheint, also dort, wo die Versetzung liegt. Das stimmt sehr gut mit den beobachteten Kontrasten überein. Vervollständigt man nämlich die punktierten Linien in Abb. 2 b und 2 d, die die Lagen der Versetzungslinien angeben, so laufen sie in der Mitte des Reflexes im Fall  $n=2$  genau durch das Zusatzmaximum, bzw. im Fall  $n=4$  durch das mittlere Maximum. Allgemein kann man sagen, daß die Maxima symmetrisch zur Versetzungslinie liegen.

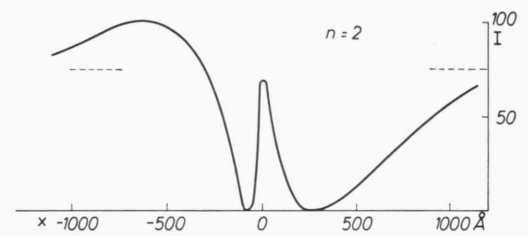


Abb. 3 a.

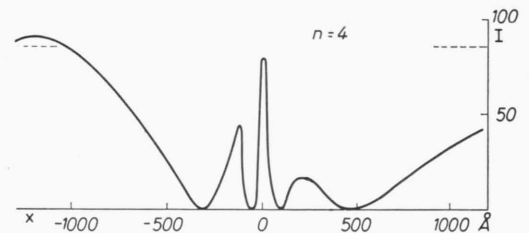


Abb. 3 b.

Abb. 3 a, b. Mit dem Amplituden-Phasen-Diagramm berechnete Intensitäten in willkürlichen Einheiten als Funktion des Abstandes von der Versetzung, a)  $n=2$ , b)  $n=4$ .

Die Äquidistanz der Maxima in Abb. 2 d ist in der dazugehörigen Kurve (Abb. 3 b) nicht so gut erfüllt. Das mag u. a. daran liegen, daß die Ungenauigkeiten bei der graphischen Darstellung des Amplituden-Phasen-Diagramms für kleine  $|x|$  wegen der auftretenden großen Winkel  $n \arctg(z/x)$  beträchtlich werden können. Auch die Werte  $t_0$  und  $t$  haben darauf einen Einfluß. Das Störungsfeld der benachbarten Versetzung wird sich ebenfalls noch auswirken. Ferner wurden die Versetzungen als reine Schraubenversetzungen angenommen, was jedoch nicht genau zutrifft. Alle diese Faktoren ändern aber die Zahl der Maxima nicht.

Eine ausführliche Behandlung dieses Themas ist in Vorbereitung.

Wir danken der Arbeitsgemeinschaft für Elektronenoptik, den Wirtschaftsministerien des Bundes und des Landes Baden-Württemberg für ihre Unterstützung.

\* Abb. 2 a–d auf Tafel S. 252 b.