

ing the characteristics β_c , β_T of the fluctuating quantities c and T in equ. (66) remain undetermined within the frame of the theory used in this investigation. They have to be fixed either by experiments or by additional theoretical assumptions. The other quantities $\partial \overline{c^2}/\partial t$, $\partial \overline{T^2}/\partial t$ on which β_c and β_T depend, can be related to the mean square gradients¹¹

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{T^2} = -\frac{4}{3} \frac{\pi'}{n} (\text{grad } T)^2, \quad \frac{\partial}{\partial t} \overline{c^2} = -2 D (\text{grad } c)^2. \quad (67)$$

¹¹ A. M. OBUKHOV, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Geograf. Geofiz. **13**, 58 [1949]. German translation in „Sammelband zur statistischen Theorie der Turbulenz“, Akademie-Verlag, Berlin 1958.

$\overline{\partial v_l^2}/\partial t$ is by definition equal to $(2/3)\varepsilon$, where ε denotes the rate of energy dissipation per unit mass and unit time. The K and θ dependence of equ. (66) is the same as that found by SILVERMAN³, who determined the scattering cross section by qualitatively applying the statistical theory of turbulence to the electron density. SILVERMAN did not account for the effect of collisions on the dielectric constant and neglected the influence of neutral gas density and temperature fluctuations.

Acknowledgments: I am grateful to Professor M. S. UBEROI for suggesting and promoting this work.

Dynamische Theorie der Röntgenstrahl-Interferenzen an schwach verzerrten Kristallgittern

II. Strahlenoptik von BLOCH-Wellen im allgemeinen Fall und im Zweistrahlfall

KYOZABURO KAMBE

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin-Dahlem *

(Z. Naturforsch. **23 a**, 25—43 [1968]; eingegangen am 5. September 1967)

A geometrical-optical approach to the problem of the propagation of X-rays in weakly deformed crystals is developed in a general form along the lines of the Hamilton-Jakobi theory. It starts from the eikonal equation, which has been derived from Maxwell's equations in Part I¹ and arrives at the equations of PENNING and POLDER³ and Fermat's principle by KATO⁴. The amplitude equation, which has also been derived in Part I, is interpreted by means of the energy-flow picture, the absorption being taken into account.

Application of the theory to the two-beam case gives an equation of rays, which has a remarkable resemblance to the relativistic equation of motion of charged particles in an electromagnetic field. Representation of the lattice distortion by a displacement vector enables one to obtain equations of rays, phases and amplitudes in a form suited to the practical calculation.

Im ersten Teil¹ dieser Arbeit wurde gezeigt, daß sich die Fortpflanzung von Röntgen-Strahlen in schwach verzerrten Kristallgittern durch eine strahlenoptische Näherung beschreiben läßt. Durch den gleichzeitigen Übergang zu sehr hohen Frequenzen und sehr kleinen Gitterperioden wurden aus der Wellengleichung eine Eikonalgleichung und die zugehörige Amplitudengleichung abgeleitet.

Bei Kenntnis der Eikonalgleichung verfügt man über die üblichen mathematischen Methoden der geometrischen Optik² zur Berechnung von Strahlen, z. B. die Hamiltonschen kanonischen Gleichungen

(PENNING und POLDER³) und das Fermatsche Prinzip (KATO⁴). Die *Strahlen* werden zunächst als Integrationswege für die Lösung der Eikonal- und Amplitudengleichung eingeführt. Sie haben darüber hinaus eine physikalische Bedeutung als Wege der Fortpflanzung schmaler Wellenbündel sowie der Energieströmung. Die Amplitudengleichung kann als Energieerhaltungsgesetz aufgefaßt werden.

Nachdem die Theorie im Teil A der vorliegenden Arbeit in allgemeiner Form entwickelt worden ist, wird sie im Teil B auf den Zweistrahlfall, nämlich den Interferenzfall an einer Netzebene, angewandt.

* Abteilung Prof. Dr. K. MOLIÈRE.

¹ K. KAMBE, Z. Naturforsch. **20 a**, 770 [1965].

² M. BORN u. E. WOLF, Principles of Optics, Pergamon Press, London 1959. Kap. 3.

³ P. PENNING u. D. POLDER, Philips Res. Rep. **16**, 419 [1961].

⁴ N. KATO, J. Phys. Soc. Japan **18**, 1785 [1963]; **19**, 67, 971 [1964]. Das Fermatsche Prinzip wurde von KATO aus den Maxwell'schen Gleichungen mit Hilfe von „modifizierten Blochschen Funktionen“ ebenfalls über eine Eikonalgleichung hergeleitet.



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 digitalized 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.

Nach Anwendung von in der dynamischen Theorie üblichen Näherungen und nach näherer Untersuchung des Effekts der Gitterverzerrung erhält man eine für die praktische Rechnung geeignete Form der Strahlengleichung sowie Integralausdrücke für die Phase und Amplitude der Wellenfunktion.

A. Strahlenoptik in allgemeiner Form

1. Kanonische Gleichungen und Strahlen

Die Resultate des I. Teils kann man folgendermaßen zusammenfassen. Es wurde eine Näherungslösung abgeleitet für die Wellengleichung des Vektorpotentials \mathfrak{A} der Röntgenwelle

$$(2\pi\nu_0/c)^2 \mathfrak{A} = \text{rot rot } \mathfrak{A} + u(\mathbf{r}) \mathfrak{A}. \quad (1)$$

Bezüglich der Definition der Funktion $u(\mathbf{r})$ vgl. den I. Teil. $u(\mathbf{r})$ hat im Falle des Idealkristalls die strenge Periodizität des Gitters und weicht davon ab, wenn der Kristall verzerrt ist. Die Absorption wird in diesem Teil der Arbeit nur insoweit berücksichtigt, als sie sich durch eine *komplexe* Funktion $u(\mathbf{r})$ darstellen läßt (s. Kap. A.3).

Bei einem Idealkristall kann man die Lösung der Wellengleichung als Überlagerung von Blochschen Funktionen

$$\mathfrak{A} = \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathfrak{k}) = \sum_n \mathfrak{A}_n \exp\{2\pi i(\mathfrak{k}_n \mathbf{r})\} \quad (2)$$

darstellen. Für ein schwach verzerrtes Gitter liefert die strahlenoptische Näherung die der Blochschen Funktion entsprechende Lösung, die in der Nähe eines Gitterpunktes \mathbf{r}_p die Form

$$\mathfrak{A} \approx F(\mathbf{r}_p) \boldsymbol{\beta}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p; \mathfrak{k}(\mathbf{r}_p)) \quad (3)$$

hat. Der Wellenvektor $\mathfrak{k}(\mathbf{r}_p)$ und die Amplitudenfunktion $F(\mathbf{r}_p)$ sind gegeben durch

$$\mathfrak{k}(\mathbf{r}) = \nabla_{\mathbf{r}} S_0(\mathbf{r}), \quad (4)$$

$$F(\mathbf{r}) = \exp\{S_1(\mathbf{r}) + 2\pi i S_0(\mathbf{r})\}. \quad (5)$$

$S_0(\mathbf{r})$ und $S_1(\mathbf{r})$ sind reelle Funktionen. Sie bestimmen nach (5) und (3) die Phase und Amplitude von \mathfrak{A} . Die Amplitude und Phase der Funktion

$$\boldsymbol{\beta}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p; \mathfrak{k}(\mathbf{r}_p))$$

sind vorgewählt.

Der Wellenvektor $\mathfrak{k}(\mathbf{r})$ muß der Gleichung der lokalen Dispersionsfläche

$$\nu_0 = \nu(\mathfrak{k}, \mathbf{r}) \quad (6)$$

genügen, oder anders ausgedrückt, $S_0(\mathbf{r})$ muß die Eikonalgleichung

$$\nu_0 = \nu(\nabla_{\mathbf{r}} S_0, \mathbf{r}) \quad (7)$$

erfüllen. Für $S_1(\mathbf{r})$ gilt die Amplitudengleichung

$$(\nabla_{\mathbf{r}} S_1 \nabla_{\mathbf{r}} \nu) + \frac{1}{2} \text{div}(\nabla_{\mathbf{r}} \nu) = 2\pi \delta \nu(\mathfrak{k}, \mathbf{r}), \quad (8)$$

wobei in die Funktion $\nabla_{\mathbf{r}} \nu$ und $\delta \nu$ der Ausdruck (4) für \mathfrak{k} einzusetzen ist. Die Bedeutung der Funktion $\delta \nu$ ist in Teil I, § 6 erklärt.

Die Form der Gln. (7) und (8) zeigt, daß es sich hierbei *formal* um die Strahlenoptik einer Welle in einem anisotropen, inhomogenen, schwach absorbierenden Medium handelt. Um dies zu zeigen, werden im folgenden die wesentlichen Züge dieser Strahlenoptik beschrieben.

Wenn wir die Anfangswerte von $S_0(\mathbf{r})$ und $S_1(\mathbf{r})$ auf einer Fläche vorgeben (s. Kap. A.4), haben wir es mit einem Anfangswertproblem der partiellen Differentialgleichungen (7) und (8) zu tun. Man weiß nun (s. Anhang 1 sowie COURANT-HILBERT⁵), daß das Anfangswertproblem der Eikonalgleichung äquivalent ist mit dem Anfangswertproblem der kanonischen Gleichungen, die in Parameterdarstellung lauten:

$$d\mathbf{r}/ds = \lambda(s) \nabla_{\mathbf{r}} \nu, \quad (9)$$

$$d\mathfrak{k}/ds = -\lambda(s) \nabla_{\mathbf{r}} \nu. \quad (10)$$

s ist hierbei ein beliebig zu wählender Parameter und $\lambda(s)$ ein Faktor, der erst durch die Wahl von s bestimmt werden kann (s. dazu auch Kap. A.2). Im I. Teil, § 7 wurde für s die Zeit t gewählt, und es war in diesem Fall $\lambda(t) = 1$. Hier nehmen wir für s die Länge l der Lösungskurve $\mathbf{r}(s)$. Dies bedeutet, daß wir eine Zusatzbedingung

$$|d\mathbf{r}/dl|^2 = 1 \quad (11)$$

zu erfüllen haben. Man findet nach (9) sofort

$$\lambda(l) = 1/|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|. \quad (12)$$

Die kanonischen Gleichungen lauten also

$$\frac{d\mathbf{r}}{dl} = \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \nabla_{\mathbf{r}} \nu, \quad (13)$$

$$\frac{d\mathfrak{k}}{dl} = -\frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \nabla_{\mathbf{r}} \nu. \quad (14)$$

⁵ R. COURANT u. D. HILBERT, Methoden der mathematischen Physik, Bd. II, 1937, Kap. 2.

Sie sind äquivalent mit den Gl. (15) und (18) von PENNING und POLDER^{3, 6}.

Die kanonischen Gleichungen bilden ein System von *gewöhnlichen* Differentialgleichungen erster Ordnung. Sie sind normalerweise (auch numerisch) leichter zu lösen als die Eikonalgleichung. Auf der Anfangsfläche für die Eikonalgleichung wird ein Anfangspunkt r_0 gewählt, für den der Anfangswert von f aus dem Anfangswert von $S_0(r)$ nach (4) und (6) leicht auszurechnen ist. Durch Lösung der kanonischen Gleichungen werden die Funktionen $r(l)$ und $f(l)$ für jeden Anfangspunkt r_0 ermittelt. Die Kurven $r(l)$ bezeichnen wir als *Strahlen*.

Aus dem Anfangswert $S_0(r_0)$ kann man dann die Funktion $S_0(r)$ längs eines Strahles berechnen, und zwar durch die Quadratur

$$S_0(r) - S_0(r_0) = \int_{r_0}^r (f dr) = \int_{l_0}^l \left(f \frac{dr(l)}{dl} \right) dl. \quad (15)$$

Die Amplitudengleichung (8) wird unter Benutzung von (13) umgeformt:

$$\frac{dS_1}{dl} = \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \left[-\frac{1}{2} \operatorname{div}(\nabla_{\mathbf{r}} \nu) + 2\pi \delta \nu \right]. \quad (16)$$

Die Funktion $S_1(r)$ läßt sich daher aus dem Anfangswert $S_1(r_0)$ durch die Quadratur

$$S_1(r) - S_1(r_0) = \int_{l_0}^l \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \left(-\frac{1}{2} \operatorname{div}(\nabla_{\mathbf{r}} \nu) + 2\pi \delta \nu \right) dl \quad (17)$$

längs des Strahles berechnen. Man beachte, daß die Gl. (15) und (17) sich voneinander unabhängig aus den Lösungen der kanonischen Gleichungen ergeben.

Mit $S_0(r)$ und $S_1(r)$ ist gemäß (4) und (5) die strahlenoptische Näherungslösung (3) der Wellengleichung (1) gegeben. Es handelt sich hier jedoch *nicht nur* um die Fälle, in denen etwa eine ebene Welle mit einer unendlich ausgedehnten Wellenfront in den Kristall eingestrahlt wird, so daß wir es mit

einer den ganzen Kristall ausfüllenden Wellenfunktion zu tun haben. Die Strahlenoptik ermöglicht es darüber hinaus, solche Fälle zu behandeln, in denen statt einer ebenen Welle ein schmales Bündel von Wellen in den Kristall eingestrahlt wird. Der *Strahl* $r(l)$ ist nämlich gerade die Bahn eines solchen schmalen Bündels im Kristall. Dies kann man zeigen, indem man das eingestrahlte Bündel im Vakuum als Überlagerung von ebenen Wellen darstellt⁷.

2. Die Strahlengleichung und die Variationsprobleme

Durch Elimination von f kann man die kanonischen Gleichungen zu *einer* Gleichung zusammenfassen. Aus (13):

$$\dot{\mathbf{r}} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{dl} = \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \nabla_{\mathbf{r}} \nu \quad (18)$$

und (6) wird f als Funktion von \mathbf{r} und $\dot{\mathbf{r}}$ mit ν_0 als Parameter ermittelt⁸:

$$f = f(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})_{\nu_0}. \quad (19)$$

Einsetzen in (14) liefert

$$\frac{d}{dl} f(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})_{\nu_0} = -[\nabla_{\mathbf{r}} \nu / |\nabla_{\mathbf{r}} \nu|]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})_{\nu_0}}. \quad (20)$$

Dies bedeutet, in Komponenten geschrieben, ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen *zweiter* Ordnung. Wir nennen (20) die *Strahlengleichung*.

Die Eikonalgleichung (7) und die dazu äquivalenten kanonischen Gln. (9), (10) sind notwendige Bedingungen für die Lösung eines Variationsproblems (s. Anhang 1)

$$0 = \delta \int_{r_0}^{r_1} (f dr) = \delta \int_{s_0}^{s_1} (f(s) dr(s)/ds) ds \quad (21)$$

mit der Nebenbedingung (6). Dies ist ein Variationsproblem in der *kanonischen* Form. Variiert werden

⁶ Von PENNING und POLDER wurde allerdings angenommen, daß $\nu(\mathbf{f}, \mathbf{r})$ von \mathbf{r} nur über den reziproken Gittervektor \mathbf{b} abhängt, d.h.

$$\nu(\mathbf{f}, \mathbf{r}) = \nu(\mathbf{f}, \mathbf{b}(\mathbf{r})).$$

Deshalb müßte man die Gl. (14) in Übereinstimmung mit Gl. (18) von PENNING und POLDER so formulieren:

$$\frac{df}{dl} = -\frac{1}{|\nabla_{\mathbf{r}} \nu|} \widehat{\nabla_{\mathbf{r}} (\mathbf{b}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{b}} \nu)}.$$

Der Bogen bedeutet, daß die Differentiation $\nabla_{\mathbf{r}}$ nur auf $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ wirkt.

⁷ Man verfolgt hierbei genau denselben Weg wie im I. Teil, Anhang 5, und zwar diesmal ohne den Zeitfaktor, d.h. ohne Integration über die Schwingungszahl ν_0 . Während die Funktion $r(t)$ dort die Bewegung des Paket-zentrums beschreibt, stellt die Funktion $r(l)$ hier die Spur der Mittellinie des Bündels dar. — Es handelt sich hierbei um eine physikalische Interpretation eines für die Hamilton-Jacobische Theorie grundlegenden Satzes (COURANT-HILBERT⁵ Bd. 2, Kap. 2, A. SOMMERFELD, Vorlesungen über theoretische Physik, Bd. 1, Mechanik, Akad. Verl., Leipzig 1964, Kap. 8), der besagt, daß aus den Lösungen, d.h. den vollständigen Integralen der Hamilton-Jacobischen Gl. (7) die Lösungen der kanonischen Gln. (13), (14) abgeleitet werden können.

⁸ Diese Variablenänderung von f zu $\dot{\mathbf{r}}$ stellt mit Einführung der Funktion $f(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})_{\nu_0}$ durch (23) eine Legendresche Transformation in Parameterdarstellung dar (vgl. Anhang 1).

dabei r und f zwischen den beiden festen Punkten r_0 und r_1 . Die Euler-Lagrangeschen Gleichungen dieses Problems sind gerade die kanonischen Gln. (9), (10). Man sieht, daß $\lambda(s)$ ein Lagrangescher Multiplikator ist, dessen Wert erst nach der Wahl von s bestimmt werden kann.

Wir wählen für s die Kurvenlänge l wie in Kap. A.1. Die obige kanonische Form kann dann in eine gewöhnliche Form des Variationsproblems gebracht werden. Man rechnet nämlich aus einer Euler-Lagrangeschen Gl. (18) mit der Nebenbedingung (6) die Funktion (19) aus und setzt diese in (21) ein:

$$0 = \delta \int_{l_0}^{l_1} f(r, \dot{r})_{r_0} dl \quad (22)$$

$$\text{mit} \quad f(r, \dot{r})_{r_0} = (f(r, \dot{r})_{r_0})_{\dot{r}}. \quad (23)$$

(22) ist ein Variationsproblem in der gewöhnlichen Form, bei welchem nur r variiert wird, d. h. verschiedene Wege zwischen den festen Punkten r_0 und r_1 verglichen werden. Der Wert des Integrals wird durch die Wahl des Weges eindeutig bestimmt. (22) ist in diesem Sinne das Fermatsche Prinzip unseres Problems (KATO⁴). [Wie es in der geometrischen Kristalloptik üblich ist, wird $n = (c/v_0) |f(r, \dot{r})_{r_0}|$ als Brechungsindex, $n_r = (c/v_0) f(r, \dot{r})_{r_0}$ als Strahlenindex bezeichnet (BORN-WOLF² S. 666).]

Die Euler-Lagrangesche Gleichung von (22) ist

$$\frac{d}{dl} \nabla_{\dot{r}} f(r, \dot{r})_{r_0} = \nabla_r f(r, \dot{r})_{r_0}. \quad (24)$$

Mit Berücksichtigung der aus (6), (18), (19) und (23) folgenden Relationen⁹

$$\nabla_{\dot{r}} f(r, \dot{r})_{r_0} = f(r, \dot{r})_{r_0}, \quad (25)$$

$$\nabla_r f(r, \dot{r})_{r_0} = - [\nabla_r v / |\nabla_{\dot{r}} v|]_{\dot{r}=f(r, \dot{r})_{r_0}} \quad (26)$$

sieht man sofort, daß (24) mit der Strahlengleichung (20) identisch ist.

3. Intensität der Strahlen und Energieströmung

Multipliziert man die Amplitudengleichung (8) mit $\exp\{2S_1\}$, so folgt

$$\frac{1}{2} \operatorname{div} (\exp\{2S_1\} \nabla_{\dot{r}} v) = 2\pi \delta v \exp\{2S_1\}. \quad (27)$$

Nach (3) und (5) ist

$$\exp\{2S_1\} = |F(r)|^2 \approx \int_v |\mathfrak{U}|^2 dr, \quad (28)$$

wobei das Integral ein Volumenintegral über eine Elementarzelle v bedeutet.

Unter der physikalisch stets berechtigten Annahme (s. Teil I, Anhang 1), daß $u \ll (2\pi v_0/c)^2$ ist, folgt aus (1) unmittelbar

$$\overline{\overline{W}} \approx \frac{1}{8\pi v} \int_v |\mathfrak{U}|^2 dr = \frac{1}{8\pi v} \left(\frac{2\pi v_0}{c} \right)^2 \int_v |\mathfrak{U}|^2 dr. \quad (29)$$

$\overline{\overline{W}}$ ist hierbei die zeitlich und räumlich über eine Elementarzelle gemittelte Energiedichte. Es folgt daher

$$\exp\{2S_1\} \approx 8\pi v (c/(2\pi v_0))^2 \overline{\overline{W}}. \quad (30)$$

Nach WAGNER¹⁰ gilt für den Mittelwert des Poynting-Vektors \mathfrak{E}

$$\mathfrak{E} = \overline{\overline{W}} \nabla_{\dot{r}} v. \quad (31)$$

Diese Gleichung gilt hier auch näherungsweise und besagt mit (13), daß der gemittelte Energiefluß parallel zum Strahl gerichtet ist. In diesem Sinne ist der Strahl *der Weg des Energieflusses*.

Es folgt aus (27), (30) und (31)

$$\operatorname{div} \mathfrak{E} = 4\pi \delta v \overline{\overline{W}}. \quad (32)$$

Folglich muß ohne Absorption, d. h. wenn $\delta v = 0$ (s. Teil I, § 6), das Vektorfeld von \mathfrak{E} quellenfrei sein. Mit Absorption ist die rechte Seite von (32) negativ und stellt die mit $\overline{\overline{W}}$ proportionale Stärke von räumlich kontinuierlich verteilten Senken der Energiestromdichte \mathfrak{E} dar.

Auf diese Weise läßt sich die Amplitudengleichung (8) als Energieerhaltungsgesetz interpretieren. Diese Ableitung im Rahmen der strahlenoptischen Näherung bezieht sich aber nur auf den Raum-Zeit-Mittelwert.

Für die Berechnung der Funktion $S_1(r)$ setzen wir

$$S_1(r) = S_{10}(r) + S_{11}(r) \quad (33)$$

mit der Annahme

$$\operatorname{div} (\exp\{2S_{10}\} \nabla_{\dot{r}} v) = 0. \quad (34)$$

Aus (27) folgt

$$(\nabla_r S_{11} \nabla_{\dot{r}} v) = 2\pi \delta v. \quad (35)$$

Wir rechnen S_{10} und S_{11} aus diesen beiden Gleichungen getrennt aus.

⁹ Diese Relationen stellen die Umkehrung der Legendreschen Transformation (19), (23) dar (vgl. Anhang 1).

¹⁰ E. H. WAGNER, Acta Cryst. **12**, 345 [1959]; Z. Phys. **154**, 352 [1959].

Es gilt nämlich der Gl. (17) entsprechend

$$S_{10}(\mathbf{r}) - S_{10}(\mathbf{r}_0) = -\frac{1}{2} \int_{l_0}^l \frac{\operatorname{div}(\nabla_{\mathbf{f}} \nu)}{|\nabla_{\mathbf{f}} \nu|} dl, \quad (36)$$

$$S_{11}(\mathbf{r}) - S_{11}(\mathbf{r}_0) = \int_{l_0}^l \frac{2\pi \delta \nu}{|\nabla_{\mathbf{f}} \nu|} dl. \quad (37)$$

Da aber die Berechnung der Größe $\operatorname{div}(\nabla_{\mathbf{f}} \nu)$ umständlich ist, wird $S_{10}(\mathbf{r})$ einfacher auf folgende Weise abgeleitet.

Nach (13) ist $\nabla_{\mathbf{f}} \nu$ parallel zum Strahl gerichtet. Wenn man entlang einem Strahl ein dünnes Röhrchen aus den benachbarten Strahlen bildet, dessen Querschnitt $\delta\sigma$ sei, dann folgt aus (34) mit Hilfe des Gaußschen Satzes

$$\exp\{2S_{10}\} |\nabla_{\mathbf{f}} \nu| \delta\sigma = \text{const.} \quad (38)$$

Nach der obigen Energiebetrachtung bedeutet diese Gleichung, daß der Energiefluß in diesem Röhrchen entlang dem Strahl konstant bleiben würde, wenn keine Absorption vorhanden wäre. Der Ausdruck (38) ist geeignet für die praktische Berechnung von $S_{10}(\mathbf{r})$ (s. Kap. B.4.β).

Die Änderung der mittleren Stromdichte $|\bar{\mathfrak{E}}|$ durch die Absorption wird nach Gln. (30) bis (35) durch die Änderung des Faktors $\exp\{2S_{11}\}$ gegeben. Man definiert demnach den auf die Strahlenrichtung bezogenen Absorptionskoeffizienten μ_s durch

$$\mu_s = -\frac{1}{\exp\{2S_{11}\}} \frac{d}{dl} \exp\{2S_{11}\} = -2 \frac{dS_{11}}{dl}. \quad (39)$$

Nach (35) und (13) folgt

$$\mu_s = \mu_s(\mathbf{f}, \mathbf{r}) = -\frac{4\pi \delta \nu}{|\nabla_{\mathbf{f}} \nu|}. \quad (40)$$

Gl. (37) wird demnach

$$S_{11}(\mathbf{r}) - S_{11}(\mathbf{r}_0) = -\frac{1}{2} \int_{l_0}^l \mu_s(\mathbf{f}(l), \mathbf{r}(l)) dl. \quad (37a)$$

Entsprechend der üblichen Näherung, in der die Absorption durch eine komplexe dielektrische Konstante repräsentiert wird (s. VON LAUE¹¹, S. 403 ff.), betrachten wir die Größe $u(\mathbf{r})$ in der Wellengleichung (1) als einen komplexen Skalar¹². Dann kann

man zeigen (Anhang 2), daß näherungsweise gilt

$$\delta \nu = \sum_n \frac{\partial \nu}{\partial u_{rn}} u_{in}, \quad (41)$$

wobei u_{rn} bzw. u_{in} die n -ten Fourier-Koeffizienten des reellen bzw. imaginären Teils der Funktion $u(\mathbf{r})$ sind. Man hat daher nach (40)

$$\mu_s(\mathbf{f}, \mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{|\nabla_{\mathbf{f}} \nu|} \sum_n \frac{\partial \nu}{\partial u_{rn}} u_{in}. \quad (42)$$

Diese Formel wurde schon von PENNING und POLDER³ in anderer Weise hergeleitet.

4. Die Grenzbedingungen an der Kristalloberfläche

Für eine monochromatische, elektromagnetische Welle wird an der Grenzfläche zweier Medien die Stetigkeit der tangentialen Komponenten von \mathfrak{E} und \mathfrak{H} , d. h. \mathfrak{A} und $\operatorname{rot} \mathfrak{A}$ gefordert. Normalerweise wird die Spiegelreflexion der Röntgen-Welle an der Oberfläche des Kristalls vernachlässigt, so daß nur die Stetigkeit der Tangentialkomponenten von \mathfrak{A} zu berücksichtigen ist.

Ist die Oberfläche eine Ebene, und ist der Kristall ideal, dann entstehen aus einer einfallenden ebenen Welle an der Oberfläche mehrere Blochsche Wellen (Wellenfelder). Die Wellenvektoren und Amplituden der Blochschen Wellen können aus der obigen Grenzbedingung bestimmt werden.

Ist die Oberfläche nicht eben, der Kristall nicht ideal und außerdem die einfallende Welle keine ebene Welle, dann ist es nicht sicher, ob die Welle im Kristall überhaupt als Überlagerung von Blochschen Wellen darstellbar ist. Wenn jedoch die Krümmungen der Oberfläche, des Kristallgitters und der Wellenfront der einfallenden Welle im Vergleich mit der Wellenlänge und den Gitterperioden nicht allzu stark sind, dann kann man die strahlenoptische Näherung auch auf die Oberfläche anwenden, d. h., wie im I. Teil, zum Grenzfall der unendlich kleinen Wellenlänge und Gitterkonstanten übergehen.

Man behandelt natürlich die Welle im Vakuum auch strahlenoptisch, d. h. man setzt dort

$$\mathfrak{A} = e(\mathbf{r}) \exp\{S_1(\mathbf{r}) + 2\pi i S_0(\mathbf{r})\}, \quad (43)$$

¹¹ M. v. LAUE, Röntgenstrahlinterferenzen, Akad. Verlag, Frankfurt/M. 1960.

¹² Nach VON LAUE¹¹ (S. 398 ff.) ist dies bei Kristallen mit schweren Atomen und in spektraler Nähe ihrer K- und L-Kanten berechtigt. Es handelt sich dabei um Annäherung der Matrixelemente der Atomanregung durch

den sogenannten Dipolterm (H. HÖNL, Ann. Phys. (5) 18, 625 [1933]). Nach G. HILDEBRANDT und H. WAGENFELD (Acta Cryst. 16 Suppl. A 160 [1963]; H. WAGENFELD, Phys. Rev. 144, 216 [1966]; A. J. GUTTMANN u. H. WAGENFELD, Acta Cryst. 22, 334 [1967]) ist diese Näherung schon für S_i ($Z = 14$) ziemlich gut erfüllt.

wobei $\epsilon(\mathbf{r})$ der die Polarisation darstellende Einheitsvektor ist. An einem Punkt der Oberfläche kann diese Welle näherungsweise als ebene Welle betrachtet werden:

$$\mathfrak{U} \approx \epsilon(\mathbf{r}_p) \exp\{S_1(\mathbf{r}_p) + 2\pi i S_0(\mathbf{r}_p)\} \times \exp\{2\pi i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla_{\mathbf{r}} S_0)\}. \quad (44)$$

Die Wellen im Kristall werden auch an diesem Punkt nach (3) durch Blochsche Funktionen dargestellt. Die Oberfläche wird durch ihre Tangentialebene, und der Kristall durch den lokalen Idealkristall (s. I. Teil, § 3) ersetzt. Man berechnet dann die Anpassung der ebenen Welle im Vakuum und der Blochschen Wellen im Kristall genau wie bei der ebenen Oberfläche eines Idealkristalls. Diese Anpassung muß Punkt für Punkt auf der Oberfläche durchgeführt werden, etwa wie es in der Lichtoptik bei der Linsenoberfläche geschieht. Man kann allerdings die atomare Unebenheit der Oberfläche nicht berücksichtigen.

Die entstandenen Blochschen Wellen sind mit dem Index (i) der Schalen der Dispersionsfläche zu indizieren (s. I. Teil, § 1). Für jeden Index (i) erhält man auf diese Weise den Anfangswert von $F^{(i)}(\mathbf{r})$ auf der Oberfläche, und daraus wird die strahlenoptische Wellenlösung nach der Methode von Kap. A.1, für jeden Index (i) getrennt, berechnet. Die Wellen, die zu unterschiedlichen Indices (i) gehören, pflanzen sich zwar unabhängig voneinander fort, sind jedoch miteinander kohärent, so daß man bei der Berechnung der Intensität deren Interferenz berücksichtigen muß.

Auf Grund dieser strahlenoptischen Behandlung wird der Strahl, der im Vakuum gradlinig verläuft, an der Oberfläche *gebrochen*. Man hat eine Mehrfachbrechung, d. h. es entstehen an der Oberfläche mehrere Strahlen, die sich in den Kristall hinein voneinander unabhängig fortpflanzen.

B. Zweistrahlfall

1. Die lokale Dispersionsfläche

Im Zweistrahlfall interessieren wir uns für den Wertebereich von \mathfrak{k} , in dem die Gleichung der lokalen Dispersionsfläche (6)

$$v_0 = v(\mathfrak{k}, \mathbf{r}) \quad (45)$$

und die Braggsche Bedingung für eine Reflexion mit dem Index h

$$|\mathfrak{k}| = |\mathfrak{k} + \mathfrak{b}_h| \quad (46)$$

und *nicht* für andere Reflexionen erfüllt ist.

Die Funktion $v(\mathfrak{k}, \mathbf{r})$ ist in diesem Gebiet in einer impliziten Form gegeben (s. Anhang 3):

$$(4\pi^2 |\mathfrak{k}|^2 + u_0 - (2\pi v/c)^2) \cdot (4\pi^2 |\mathfrak{k} + \mathfrak{b}_h|^2 + u_0 - (2\pi v/c)^2) - C^2 |u_h|^2 = 0, \quad (47)$$

wobei die Größen u_0 , u_h , \mathfrak{b}_h , C Funktionen von \mathbf{r} sind. Dieser Ausdruck definiert vier Eigenwerte von v , denn erstens ist diese Gleichung quadratisch in v^2 (v ist nach (45) nicht negativ), und zweitens sind die beiden Polarisationsfälle durch verschiedene Funktionen C charakterisiert:

$$\begin{cases} C = 1 & \text{für senkrechte Polarisation,} \\ C = |\cos 2\vartheta_B| = \left| 1 - 2 \left(\frac{c |\mathfrak{b}_h|}{2v} \right)^2 \right| & \text{für parallele Polarisation.} \end{cases} \quad (48)$$

Man kann aus (47) $v(\mathfrak{k}, \mathbf{r})$ leicht ausrechnen und bekommt damit die explizite Form der Gleichung der Dispersionsfläche (45), die mit den vier Eigenwerten in vier verschiedene Schalen zerfällt. Damit ist die Grundlage für die Anwendung der Strahlenoptik gegeben. Um praktisch brauchbare Formeln zu gewinnen, führen wir jedoch weitere Näherungen ein.

Für die Gültigkeit der Strahlenoptik wird verlangt, daß sich die Funktion $v(\mathfrak{k}, \mathbf{r})$, d. h. die Größen \mathfrak{b}_h , u_0 , u_h , C in (47) mit \mathbf{r} langsam ändern. Die *gesamte Änderung* dieser Größen von einem zum anderen Ende des Kristalls braucht zwar nicht klein zu sein. Wir beschränken uns jedoch auf den in Wirklichkeit auftretenden Fall, in dem die Änderung von $\mathfrak{b}_h(\mathbf{r})$ im Gesamtbereich sehr klein ist. Die Änderung von \mathfrak{k} wird demgemäß auch als sehr klein angenommen, so daß die Anwendung von (47) stets berechtigt bleibt.

Wir setzen an

$$\mathfrak{b}_h(\mathbf{r}) = \bar{\mathfrak{b}}_h + \Delta \mathfrak{b}_h(\mathbf{r}), \quad (49)$$

wobei $\bar{\mathfrak{b}}_h$ ein beliebig gewählter Bezugsvektor (z. B. der Wert für den störungsfreien Kristall) ist. Es soll überall gelten

$$|\bar{\mathfrak{b}}_h| \gg |\Delta \mathfrak{b}_h(\mathbf{r})|. \quad (50)$$

Ferner setzen wir an

$$\mathfrak{k} = \bar{\mathfrak{k}}_M + \Delta \mathfrak{k}, \quad (51)$$

wobei $\bar{\mathfrak{k}}_M$ die Bedingungen

$$|\bar{\mathfrak{k}}_M| = \frac{v_0}{c} \quad (52)$$

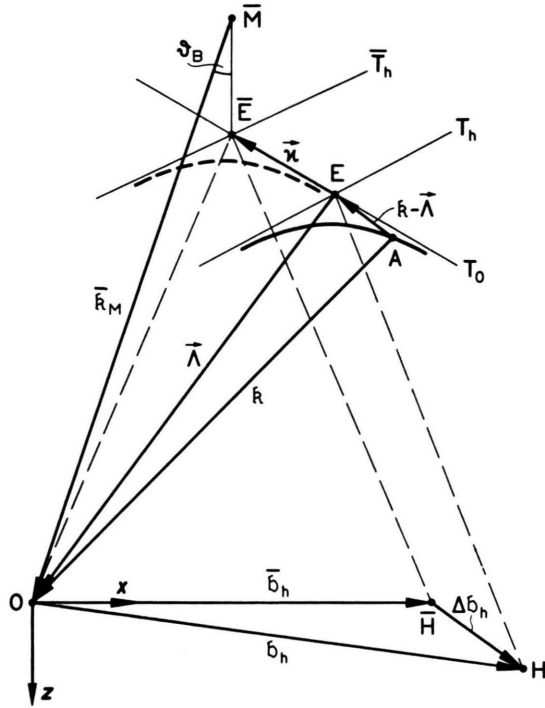
$$\text{und} \quad |\bar{\mathfrak{k}}_M| = |\bar{\mathfrak{k}}_M + \bar{\mathfrak{b}}_h| \quad (53)$$

erfüllt. $\bar{\mathbf{f}}_M$ ist also der Wellenvektor, der kinematisch die Bragg-Bedingung für $\bar{\mathbf{b}}_h$ erfüllt (s. Abb. 1). Außerdem soll $\bar{\mathbf{f}}_M$ in der Ebene liegen, worin $\mathbf{f}(r_0)$, d.h. der Anfangswert von \mathbf{f} , und $\bar{\mathbf{b}}_h$ liegen. Wir nennen diese Ebene die Strahlenebene im \mathbf{f} -Raum, weil der Vektor \mathbf{f} des Strahls stets parallel zu dieser Ebene bleibt (s. unten). Unter der Annahme, daß sich \mathbf{f} nicht stark ändert, hat man

$$|\bar{\mathbf{f}}_M| \gg |\Delta \mathbf{f}|. \quad (54)$$

Wir führen folgendes kartesisches Koordinatensystem ein: die x -Achse habe die Richtung von $\bar{\mathbf{b}}_h$, die y -Achse liege senkrecht zur Strahlenebene, und die z -Achse so, daß die z -Komponente von $\mathbf{f}(r_0)$ positiv wird. Demnach wird die z -Komponente von $\bar{\mathbf{f}}_M$ auch positiv.

Abb. 1. Die Konstruktion der Dispersionsfläche und der Wellenvektoren für das ideale und das verzerrte Gitter mit den reziproken Gittervektoren $\bar{\mathbf{b}}_h$ bzw. \mathbf{b}_h .



Wir führen die folgenden Bezeichnungen für die Vektorkomponenten ein:

$$\bar{\mathbf{b}}_h = (b, 0, 0), \quad \bar{\mathbf{f}}_M = \left(-\frac{b}{2}, 0, \frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{b}{2} \right), \quad (55)$$

$$\text{mit} \quad b = |\bar{\mathbf{b}}_h|, \quad \tan \vartheta_B = \frac{b/2}{[(v_0/c)^2 - (b/2)^2]^{1/2}}. \quad (56)$$

ϑ_B ist der Bragg'sche Winkel. Ferner

$$\Delta \mathbf{b}_h = (\Delta b_x, \Delta b_y, \Delta b_z), \quad \Delta \mathbf{f} = (\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z). \quad (57)$$

Mit den Annahmen (50) und (54) wird aus (47) näherungsweise

$$\left(\frac{v_0^2}{c^2} + \frac{u_0}{4\pi^2} - b \Delta k_x + \frac{b}{\tan \vartheta_B} \Delta k_z - \frac{v^2}{c^2} \right) \cdot \left(\frac{v_0^2}{c^2} + \frac{u_0}{4\pi^2} + b \Delta k_x + \frac{b}{\tan \vartheta_B} \Delta k_z + b \Delta b_x + \frac{b}{\tan \vartheta_B} \Delta b_z - \frac{v^2}{c^2} \right) - \left(C \frac{|u_h|}{4\pi^2} \right)^2 = 0. \quad (58)$$

Dies ist ein impliziter Näherungsausdruck der Funktion $v(\mathbf{f}, \mathbf{r})$. Es folgt daraus unmittelbar

$$\frac{\partial v}{\partial k_y} = \frac{\partial v}{\partial \Delta k_y} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial k_z} = \frac{\partial v}{\partial \Delta k_z} = \frac{b/\tan \vartheta_B}{2v/c^2} = c \cos \vartheta_B. \quad (59)$$

Letzteres gilt für $v = v_0$. Nach Teil I. § 7, Gl. (102) bedeutet das

$$dy/dt = 0, \quad dz/dt = c \cos \vartheta_B. \quad (60)$$

Die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets ist innerhalb unserer Näherung Null in der y -Richtung und konstant in der z -Richtung.

Einsetzen von $v = v_0$ nach (45) in (58) liefert die Gleichung der lokalen Dispersionsfläche in folgender etwas abgeänderter Form:

$$-(k_x - A_x)^2 + \frac{1}{\tan^2 \vartheta_B} (k_z - A_z)^2 = (CU)^2, \quad (61)$$

wobei

$$A_x = -\frac{b}{2} + \kappa_x, \quad A_z = \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} - \tan \vartheta_B \frac{u_0}{4\pi^2 b} + \kappa_z, \quad (62)$$

mit

$$\begin{cases} \kappa_x = -\frac{1}{2} \left(\Delta b_x + \frac{1}{\tan \vartheta_B} \Delta b_z \right), \\ \kappa_z = \tan \vartheta_B \cdot \kappa_x, \end{cases} \quad (63)$$

und

$$U = |u_h| / (4\pi^2 b). \quad (64)$$

C ist durch (48) gegeben.

Die Gl. (61) wird geometrisch folgendermaßen gedeutet (s. Abb. 1) (vgl. PENNING¹³ S. 67 ff.).

Wir benutzen dabei die in der dynamischen Theorie übliche Ausdrucksweise, in welcher der Vektor \mathbf{f} vom Anregungspunkt A nach dem Nullpunkt O gerichtet ist (s. VON LAUE¹¹, S. 321). Wir betrachten also den $(-\mathbf{f})$ -Raum.

Für den Idealkristall mit $\bar{\mathbf{b}}_h = \overrightarrow{OH}$ definiert der durch (55) gegebene Vektor $\bar{\mathbf{f}}_M = \overrightarrow{MO}$ den kinematischen Laue-Punkt \bar{M} . Der dynamische Laue-Punkt (oder Lorentz-Punkt genannt) \bar{E} ist der Schnittpunkt der beiden Kreise, die um O und \bar{H} mit dem Radius $[(v_0/c)^2 - (u_0/4\pi^2)]^{1/2}$ konstruiert sind. \bar{E} hat von \bar{M} in der z -Richtung den Abstand

$$\overline{ME} \approx \tan \vartheta_B (u_0/4\pi^2 b).$$

Die Dispersionsfläche für $\bar{\mathbf{b}}_h$ hat vier Schalen, die zur xz -Ebene senkrecht liegende Zylinderflächen sind und als Spur auf der xz -Ebene zwei Hyperbeln ergeben. In der Abbildung wird davon nur eine Schale

gestrichelt eingezeichnet. Die Asymptoten T_0 und \bar{T}_h sind die Tangenten der oben genannten Kreise in der Nähe von \bar{E} .

Wegen der Gitterverzerrung unterscheidet sich der Vektor \mathbf{b}_h von $\bar{\mathbf{b}}_h$ um den kleinen Betrag $\Delta \mathbf{b}_h$. Dadurch wird der dynamische Laue-Punkt von \bar{E} nach E um den kleinen Betrag von $-\vec{z}$ entlang der Asymptote T_0 verschoben. Daß die Komponenten von κ durch (63) gegeben sind, kann man aus der Geometrie der Dreiecke $O\bar{H}\bar{E}$ und OHE leicht einsehen. Der Vektor $\vec{A} = \overrightarrow{EO}$ hat daher die Komponenten (62). Die Dispersionsfläche als Ganzes wird zusammen mit E *parallel verschoben* (nur eine Schale ist in der Abbildung gezeichnet). Wenn wir die Änderung von u_0 , u_h und C vernachlässigen (Kap. B.2), ändert sich die Form der Dispersionsfläche nicht. Die Gl. (61) stellt in der Tat die hyperbolischen Zylinderflächen als Funktion der Komponenten des Abstandes $\overrightarrow{AE} = \mathbf{f} - \vec{A}$ dar.

Auf dem Weg eines Strahls durch das verzerrte Gitter verschiebt sich also die Dispersionsfläche parallel zur Asymptote T_0 hin und her. Der Vektor $\mathbf{f} = \overrightarrow{AO}$ muß sich so regulieren, daß der Anregungspunkt A immer auf einer Schale der Dispersionsfläche bleibt. Wie der Vektor \mathbf{f} sich dabei ändert, bestimmen die Eikonalgleichung oder die kanonischen Gleichungen. (Wegen der Deutung dieser Änderung siehe PENNING und POLDER³, PENNING¹³.)

2. Strahlengleichung

Für die weiteren Rechnungen ist es der Kürze halber zweckmäßig, statt der Parameterdarstellung von Kap. A.1 die nicht-symmetrischen Formeln des Anhangs I zu benutzen. Danach ist die Hamiltonsche Funktion

$$H(k_x, k_y, x, y; z) = -k_z. \quad (65)$$

Aus (61) erhält man

$$H = -A_z \pm \tan \vartheta_B [(k_x - A_x)^2 + (CU)^2]^{1/2}, \quad (66)$$

wobei ϑ_B nach (56) konstant und A_x , A_z , C und U Funktionen von x , y , z sind. Die kanonischen Gleichungen lauten

$$\frac{dx}{dz} = \frac{\partial H}{\partial k_x} = \pm \tan \vartheta_B \frac{k_x - A_x}{[(k_x - A_x)^2 + (CU)^2]^{1/2}}, \quad (67)$$

$$\frac{dk_x}{dz} = -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial A_x}{\partial x} \pm \tan \vartheta_B \frac{(k_x - A_x) \frac{\partial A_x}{\partial x} - CU \frac{\partial}{\partial x} (CU)}{[(k_x - A_x)^2 + (CU)^2]^{1/2}}, \quad (68)$$

$$\frac{dy}{dz} = \frac{\partial H}{\partial k_y} = 0, \quad (69)$$

$$\frac{dk_y}{dz} = -\frac{\partial H}{\partial y} = \frac{\partial A_z}{\partial y} \pm \tan \vartheta_B \frac{(k_x - A_x) \frac{\partial A_x}{\partial y} - CU \frac{\partial}{\partial y} (CU)}{[(k_x - A_x)^2 + (CU)^2]^{1/2}}. \quad (70)$$

¹³ P. PENNING, Thesis, TH Delft, 1966.

Außerdem ist nach Anhang 1, Gl. (A6)

$$\frac{dk_z}{dz} = -\frac{dH}{dz} = -\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial A_z}{\partial z} \pm \tan \vartheta_B \frac{(k_x - A_x) \frac{\partial A_x}{\partial z} - CU \frac{\partial}{\partial z} (CU)}{[(k_x - A_x)^2 + (CU)^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (71)$$

Aus (69) folgt sogleich

$$y = \text{const.} \quad (72)$$

Der Strahl bleibt also in einer Ebene, die wir die Strahlenebene im r -Raum nennen wollen. Diese Ebene ist parallel zur Strahlenebene im f -Raum (s. Kap. B.1).

Wir können die Gln. (67) und (68) unabhängig von den anderen Gleichungen lösen. Danach werden die Größen k_y und k_z aus (70) bzw. (71) einfach durch Quadratur berechnet. Das ganze Problem reduziert sich in dieser Weise auf die Berechnung eines Paares von kanonischen Variablen x , k_x als Funktion von z .

Die Eigenschaften der Lösung der kanonischen Gln. (67) und (68) kann man sich am besten vorstellen, wenn man die bemerkenswerte formale Ähnlichkeit unseres Problems mit dem der relativistischen Bewegung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld betrachtet¹⁴. Aus der Invarianz des Energie-Impuls-Vierervektors ergibt sich in diesem Fall

$$-\left|p - \frac{e}{c} \mathcal{A}\right|^2 + \frac{1}{c^2} (E - e\varphi)^2 = m^2 c^2. \quad (73)$$

Dieser Ausdruck hat die gleiche Form wie (61)¹⁵. Man gewinnt daraus die Hamiltonsche Funktion

$$H = E = e\varphi \pm c\{p - (e/c)\mathcal{A}\}^2 + m^2 c^2\}^{1/2}, \quad (74)$$

die unserer Hamiltonschen Funktion (66) entspricht. Die Zuordnung zwischen den Größen ist folgendermaßen:

Relativitätstheorie	t	x	p_x	$e\varphi$	$(e/c)A_x$	c	m
Röntgen-Strahlenoptik	z	x	k_x	$-A_z$	A_x	$\tan \vartheta_B$	$CU/\tan \vartheta_B$

KATO⁴ läßt der Ruhemasse m die Größe $2CU$ entsprechen. Unsere Wahl ermöglicht jedoch eine bessere Übereinstimmung zwischen beiden Formalismen.

Dieser Parallelismus erklärt unmittelbar die „relativistische“ Form der Strahlengleichung, die aus (67) und (68) durch Elimination von k_x folgt:

$$\frac{d}{dz} \left\{ \frac{CU \frac{dx}{dz}}{\tan \vartheta_B \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right\} = \pm \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) - \tan \vartheta_B \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (CU). \quad (75)$$

Die Größen C , U und u_0 [in A_z enthalten, Gl. (62)] sind für ein verzerrtes Gitter nicht konstant. Aus den Überlegungen über die Gitterverzerrung in Kap. B.3 ersieht man, daß der Effekt der Änderungen dieser Größen jedoch im Vergleich mit den Änderungen von κ_x und κ_z normalerweise vernachlässigbar klein ist (s. Anhang 6), so daß man C , U und u_0 praktisch als konstant betrachten darf¹⁶.

Man bekommt dann aus (75)

$$\frac{CU}{\tan \vartheta_B} \frac{d}{dz} \left\{ \frac{\frac{dx}{dz}}{\left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right\} = \pm \left(\frac{\partial \kappa_z}{\partial x} - \frac{\partial \kappa_x}{\partial z} \right). \quad (76)$$

¹⁴ Auf diese Tatsache wurde unabhängig vom Verfasser (K. KAMBE, Z. Naturforsch. **18a**, 1010 [1963]) auch von KATO⁴ aufmerksam gemacht.

¹⁵ Aus (73) ergibt sich bekanntlich durch Ersetzen von p und E durch die entsprechenden Differentialoperatoren die Klein-Gordonsche Wellengleichung. Dasselbe Verfahren führt (61) in eine Wellengleichung über, die mit den Takagischen Gleichungen (S. TAKAGI, Acta Cryst. **15**, 1311, Gl. (5) [1962]) äquivalent ist. Diese bemerkenswerte Tatsache soll in einer folgenden Arbeit erläutert werden.

¹⁶ Man beachte jedoch, daß die Formel (75) auch solche Fälle behandeln läßt, in denen die Änderungen von u_0 und u_h nicht vernachlässigbar sind, wenn z. B. $|u_h|$ sich mit der Gitterverzerrung empfindlich ändert, oder die Proportion der das Gitter bildenden Atomsorten stetig vom Ort abhängt.

Dieser Gleichung entspricht die aus (74) folgende relativistische Bewegungsgleichung

$$m \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\frac{dx}{dt}}{\left[1 - \left(\frac{1}{c} \frac{dx}{dt} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right\} = \mp e \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) = \pm e E_x(x, t). \quad (77)$$

Sie beschreibt die eindimensionale Bewegung in einem der x -Richtung parallelen, jedoch mit x und t veränderlichen elektrischen Feld $E_x(x, t)$.

Die „relativistische“ Form von (76) hat zur Folge, daß die Strahlenrichtung, die durch dx/dz bestimmt wird, stets mit

$$|dx/dz| < \tan \vartheta_B \quad (78)$$

zwischen den Richtungen von $\bar{\mathbf{k}}_M$ und $\bar{\mathbf{k}}_M + \bar{\mathbf{b}}_h$, d.h. den ungefähren Ausbreitungsrichtungen der primären und abgelenkten Welle liegt. Dies ist aus der Theorie des Strahlenfächers bei Idealkristallen (s. VON LAUE¹¹ S. 326, 366) schon bekannt. Die Gl. (76) besagt aber darüber hinaus, daß das Abbiegen des Strahls durch die Gitterverzerrung immer schwieriger wird mit der Zunahme von $|dx/dz|$, d.h. des Winkels zwischen Strahl und Netzebene. Diesen Effekt kann man im Sinne des mechanischen Modells (77) mit der relativistischen Zunahme der Masse in Analogie setzen. Wie schon im I. Teil¹, § 7, erläutert wurde, kann man allerdings von der Masse des Photons nicht reden. Im Falle der Elektronenbeugung jedoch kann man zeigen (s. Anhang 4), daß sich die effektive Masse des Elektrons in der x -Richtung formal nach dem „relativistischen“ Gesetz ändert.

3. Die Gitterverzerrung

Die Größe auf der rechten Seite von (76) stellt die ablenkende Wirkung der Gitterverzerrung auf den Strahl dar. κ_x und κ_z sind durch (63) gegeben, wobei Δb_x und Δb_z aus dem Verschiebungsvektor $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ der Gitterverzerrung hergeleitet werden können (vgl. Anhang 5). Die Definition des Verschiebungsvektors $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ und des reziproken Gittervektors $\mathbf{b}_h(\mathbf{r})$ enthält allerdings eine gewisse Willkür, was jedoch für kleine Verzerrungen unwesentlich ist.

Es ist nach (A 53) [vgl. PENNING und POLDER³ Gl. (21)]

$$\Delta \mathbf{b}_h = - \nabla_{\mathbf{r}} (\mathbf{v}(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{b}}_h). \quad (79)$$

Daraus folgt

$$\Delta b_x = -b \frac{\partial v_x}{\partial x}, \quad \Delta b_z = -b \frac{\partial v_x}{\partial z}, \quad (80)$$

wobei v_x die Komponente von $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ in der Richtung von $\bar{\mathbf{b}}_h$ (x -Richtung) bedeutet. Einsetzen in (63) liefert

$$\frac{\partial \kappa_z}{\partial x} - \frac{\partial \kappa_x}{\partial z} = \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} \left[\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right] \quad (\text{siehe Anm. 17}). \quad (81)$$

Einsetzen von (81) in (76) liefert die *endgültige Form der Strahlengleichung*

$$\frac{d}{dz} \left\{ \frac{\frac{dx}{dz}}{\left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right\} = \pm \frac{B}{C} \left(\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right). \quad (82)$$

Sie lautet nach leichter Umformung

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \pm \frac{B}{C} \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}} \left(\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right), \quad (83)$$

¹⁷ Man kann auch schreiben (PENNING und POLDER³, KATO⁴)

$$\frac{\partial \kappa_z}{\partial x} - \frac{\partial \kappa_x}{\partial z} = \frac{b}{2 \sin \vartheta_B \cos \vartheta_B} \left(\sin \vartheta_B \frac{\partial}{\partial x} - \cos \vartheta_B \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\sin \vartheta_B \frac{\partial}{\partial x} + \cos \vartheta_B \frac{\partial}{\partial z} \right) v_x = - \frac{b}{\sin 2 \vartheta_B} \frac{\partial^2 v_x}{\partial \xi_0 \partial \xi_h}$$

mit $\frac{\partial}{\partial \xi_0} = -\sin \vartheta_B \frac{\partial}{\partial x} + \cos \vartheta_B \frac{\partial}{\partial z}$, $\frac{\partial}{\partial \xi_h} = \sin \vartheta_B \frac{\partial}{\partial x} + \cos \vartheta_B \frac{\partial}{\partial z}$.

wobei C durch (48) gegeben ist, und nach (64) und (56)

$$B = \frac{b}{2U} = \frac{4\pi^2 |\bar{b}_h|^2}{2|u_h|} = \frac{2\sin^2 \vartheta_B}{|\chi_h|} = \left[\frac{2e^2}{\pi m c^2} \frac{d_h^2 |F_h|}{v} \right]^{-1}, \quad (84)$$

wobei $\chi_h = -\frac{c^2}{4\pi^2 v_0^2} u_h = -\frac{e^2 F_h}{\pi m v_0^2 v}$ Fourier-Koeffizient der Suszeptibilität (Teil I¹, Anh. 1; LAUE¹¹, S. 314),

$d_h = 1/|\bar{b}_h|$ Netzebenenabstand, F_h Strukturfaktor, v Volumen der Einheitszelle,
 $2e^2/(\pi m c^2) = 10,08 \cdot 10^{-6} (\text{\AA})$.

Man beachte, daß B eine dimensionslose Materialkonstante ist. Für typische Fälle ist B von der Größenordnung 10^4 . Im Falle der Elektronenbeugung ist $C=1$ und B durch (A40) gegeben.

Die Gl. (82) enthält nur die Komponente des Verschiebungsvektors senkrecht zur Netzebene. Dies ist unmittelbar einleuchtend, wenn man bedenkt, daß die Atomverschiebung innerhalb der Netzebenen keinen direkten Einfluß auf die Interferenz (Bragg-Reflexion) an diesen Netzebenen hat.

Die Größen auf der rechten Seite von (82) können geometrisch folgendermaßen gedeutet werden (vgl. BONSE¹⁸): $\partial^2 v_x / \partial x^2$ ist die relative Zunahme des Netzebenenabstandes $d_h = 1/|\bar{b}_h|$ in der Richtung von \bar{b}_h (x -Richtung), d. h. nach (80)

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} = -\frac{1}{b} \frac{\partial \Delta b_x}{\partial x} = -\frac{1}{|\bar{b}_h|} \frac{\partial |\bar{b}_h|}{\partial x} = \frac{1}{d_h} \frac{\partial d_h}{\partial x}. \quad (85)$$

$\partial^2 v_x / \partial z^2$ bestimmt die Krümmung der Netzebene entlang der z -Richtung. Der Krümmungsradius ϱ ist bekanntlich gegeben durch

$$\frac{1}{\varrho} = \frac{\partial^2 v_x / \partial z^2}{[1 + (\partial v_x / \partial z)^2]^{\frac{3}{2}}}. \quad (86)$$

Wegen des Faktors $\tan^2 \vartheta_B$ vor $\partial^2 v_x / \partial x^2$ in (82) wirkt sich die Netzebenenabstandsänderung für kleine Braggsche Winkel ϑ_B weniger aus, als die Netzebenenkrümmung. Für die Elektronenbeugung, wo ϑ_B sehr klein ist, würde deshalb nur die Netzebenenkrümmung wirksam sein.

Wenn es z. B. nur eine Netzebenenkrümmung gibt, und der Strahl ungefähr parallel zur Netzebene läuft, d. h. wenn

$$\partial^2 v_x / \partial x^2 = 0, \quad |dx/dz| \ll \tan \vartheta_B, \quad (87)$$

so erhält man aus (82) die Abschätzung

$$|d^2 x / dz^2| \approx 10^4 |\partial^2 v_x / \partial z^2|. \quad (88)$$

Die Biegung des Strahls ist etwa 10^4 -fach stärker als die Krümmung der Netzebene. Dies wurde schon experimentell von HILDEBRANDT¹⁹ bestätigt.

4. Phase und Amplitude

α) Phase

Für die Berechnung der Phase benutzen wir die Formel (A11)

$$S_0(z) - S_0(z_0) = \int_{z_0}^z L dz, \quad (89)$$

wobei L die Lagrangesche Funktion ist, die zu unserer Hamiltonschen Funktion H , Gl. (66), gehört. Man bekommt nach (A10), (66), (67), (69)

$$L = A_z + A_x \frac{dx}{dz} \mp C U \tan \vartheta_B \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (90)$$

¹⁸ U. BONSE, Z. Phys. **177**, 385 [1964].

¹⁹ G. HILDEBRANDT, Z. Krist. **112**, 312 [1959].

Nach (62), (63) und (80) ergibt sich

$$A_z + A_x \frac{dx}{dz} = \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} \left(1 - \tan^2 \vartheta_B \frac{2u_0}{4\pi^2 b^2} \right) - \frac{b}{2} \frac{dx}{dz} + \frac{b}{2} \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{dx}{dz} \right) + \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} \left(\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{dx}{dz} \right). \quad (91)$$

Es folgt aus (89)

$$S_0(z) - S_0(z_0) = \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} \left(1 - \tan^2 \vartheta_B \frac{2u_0}{4\pi^2 b^2} \right) (z - z_0) - \frac{b}{2} (x - x_0) + \frac{b}{2} (v_x(z) - v_x(z_0)) + \frac{b}{2 \tan \vartheta_B} \int_{z_0}^z \left(\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{dx}{dz} \right) dz \mp \frac{b}{2} \frac{C}{B} \tan \vartheta_B \int_{z_0}^z \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} dz. \quad (92)$$

Die ersten drei Glieder sind allein durch die Koordinaten des Anfangs- und Endpunktes bestimmt. Das dritte Glied wird nicht eindeutig, wenn eine Versetzung vorhanden ist. In diesem Falle muß man beachten, daß dieses Glied durch Integration längs eines Strahls entstanden ist. Die letzten beiden Glieder sind ebenfalls derartige Linienintegrale.

Bei Anwendungen des Ausdrucks (92) bedarf es einiger Vorsicht, besonders wenn es sich um eine lange Integrationsstrecke handelt. Es sind ja bei der Herleitung dieses Ausdrucks mancherlei Näherungen eingeführt worden. Der Effekt der vernachlässigten Größen kann sich bei der Phase noch bemerkbar machen, weil die Phase $S_0(z)$ numerisch nur bis auf den ganzzahligen Teil einen Sinn hat. Der ganzzahlige Teil entspricht einem Vielfachen des Phasenwinkels 2π .

β) Amplitude

Für die Berechnung der Amplitude sind nach Kap. A.3 $S_{10}(r)$ und $S_{11}(r)$ zu ermitteln. $S_{10}(r)$ berechnen wir nach (38). Nach (65), (67), (69) und (59) ist

$$|\nabla_{\mathbf{r}} v| = \left[1 + \left(\frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\partial v}{\partial k_z} = \left[1 + \left(\frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} c \cos \vartheta_B. \quad (93)$$

Wir denken nun, der zur z -Achse senkrechte Querschnitt des Strahlenröhrchens von Kap. A.3 sei ein Rechteck mit den Seitenlängen δx und δy . Der zum Strahl senkrechte Querschnitt $\delta\sigma$ ist dann gegeben durch

$$\delta\sigma = \delta x \delta y / [1 + (dx/dz)^2]^{1/2}. \quad (94)$$

Aus (72) folgt $\delta y = \text{const}^{20}$. Einsetzen von (94) und (93) in (38) ergibt deshalb

$$\exp\{2S_{10}\} \delta x = \text{const}. \quad (95)$$

δx ist der Abstand in der x -Richtung zweier engbenachbarter Strahlen, die in einer gemeinsamen Strahlenebene liegen. Der Wert von $S_{10}(r)$ längs eines Strahls kann aus dem Anfangswert $S_{10}(r_0)$ durch die Formel

$$\exp\{2S_{10}(r)\} \delta x(r) = \exp\{2S_{10}(r_0)\} \delta x(r_0) \quad (96)$$

berechnet werden.

Die Größe $S_{11}(r)$ kann nach (37) und (40) durch ein Integral

$$S_{11}(r) - S_{11}(r_0) = - \int_{l_0}^l \frac{\mu_s(r)}{2} dl = \int_{l_0}^l \frac{2\pi \delta v}{|\nabla_{\mathbf{r}} v|} dl \quad (97)$$

²⁰ Wir denken hier einfachheitshalber, daß die das Strahlenröhrchen bildenden Strahlen alle zur vorgewählten xz -Ebene parallel sind. Wenn das Strahlensystem eine Divergenz senkrecht zur xz -Ebene haben soll, dann wird $\delta y = C_1 z + C_2$, wobei die Konstanten C_1 und C_2 durch die Anfangsbedingung zu bestimmen sind, da die Strahlen keine Krümmung senkrecht zur xz -Ebene haben.

ermittelt werden. Mit (13) kann man schreiben

$$S_{11}(z) - S_{11}(z_0) = \int_{z_0}^z \frac{2\pi \delta v}{\frac{\partial v}{\partial k_z}} dz = - \int_{z_0}^z \frac{\mu_z(r)}{2} dz, \quad (98)$$

wobei

$$\mu_z = -4\pi \delta v / (\partial v / \partial k_z). \quad (99)$$

Diese Größe ist der auf die z -Richtung (d. h. die Richtung der orthogonalen Projektion des Strahls auf die Netzebene) bezogene Absorptionskoeffizient. δv ist gegeben durch (41). Da die Funktion v jetzt durch (58) gegeben ist, brauchen wir für den Ausdruck (41) nur u_0 , u_h und $u_{\bar{h}}$ ($|u_h|^2 = u_h u_{\bar{h}}$) zu berücksichtigen:

$$\delta v = \frac{\partial v}{\partial u_{r0}} u_{i0} + \frac{\partial v}{\partial u_{rh}} u_{ih} + \frac{\partial v}{\partial u_{r\bar{h}}} u_{i\bar{h}}. \quad (100)$$

Folglich wird mit (65)

$$\mu_z = - \frac{4\pi \delta v}{\frac{\partial v}{\partial k_z}} = -4\pi \left(\frac{\partial H}{\partial u_{r0}} u_{i0} + \frac{\partial H}{\partial u_{rh}} u_{ih} + \frac{\partial H}{\partial u_{r\bar{h}}} u_{i\bar{h}} \right). \quad (101)$$

Einsetzen von (66) ergibt

$$\mu_z = \frac{\mu}{\cos \vartheta_B} \left\{ 1 \mp A_h \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (102)$$

wobei

$$\mu = - \frac{\sin \vartheta_B}{\pi b} u_{i0} = - \frac{c}{2\pi v_0} u_{i0} = - \frac{2\pi v_0}{c} \chi_{i0}, \quad (103)$$

$$A_h = - \frac{C}{2 u_{i0}} \frac{u_{r\bar{h}} u_{ih} + u_{rh} u_{i\bar{h}}}{|u_{rh}|} = \frac{C}{2 \chi_{i0}} \frac{\chi_{r\bar{h}} \chi_{ih} + \chi_{rh} \chi_{i\bar{h}}}{(\chi_{rh} \chi_{r\bar{h}})^{1/2}}. \quad (104)$$

(vgl. LAUE¹¹, Gl. (34.10a) bzw. (34.40)²¹). Nach (40), (99) und (102) erhält man den auf die Strahlenrichtung bezogenen Absorptionskoeffizienten

$$\mu_s = \frac{\mu}{\cos \vartheta_B} \left\{ 1 \mp A_h \left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} / [1 + (dx/dz)^2]^{1/2}. \quad (105)$$

Dieser Ausdruck stimmt mit dem für den Idealkristall berechneten vollkommen überein (LAUE¹¹, S. 414).

γ) Phase und Amplitude der Komponentenwelle

Die oben berechneten Größen $S_0(r)$ und $S_1(r) = S_{10}(r) + S_{11}(r)$ bestimmen die Amplitudenfunktion $F(r)$. Daraus kann man nach (3) die Phase und Amplitude der beiden ebenen Wellen, aus denen die Wellenfunktion $\mathfrak{U}(r)$ besteht, ermitteln.

Nach Anhang 3, Gl. (A30) ist nämlich das Verhältnis zwischen den komplexen Amplituden der beiden ebenen Wellen

$$\frac{A_0}{A_h} = \frac{(-1)^r C u_{\bar{h}}}{(2\pi v_0/c)^2 - u_0 - (2\pi |f_0|)^2}. \quad (106)$$

²¹ Nach der Definition von u und χ hat man (s. I. Teil, Anhang 1) $u_r = -(2\pi v_0/c)^2 \chi_r$. Nach (103) ist jedoch $u_i = (2\pi v_0/c)^2 \chi_i$. Diese Vorzeichenänderung des imagi-

Durch Anwendung der Näherungen von Kap. B.1 erhalten wir

$$\frac{A_0}{A_h} = \pm (-1)^r \exp \{ -i \varphi_h \} \left(\frac{1 - \frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz}}{1 + \frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz}} \right)^{1/2}, \quad (107)$$

wobei φ_h der Phasenwinkel der komplexen Größe $u_h = |u_h| \exp \{ i \varphi_h \}$ ist. φ_h ist beim verzerrten Gitter eine Funktion des Ortes (s. Anhang 5). Das Phasenverhältnis zwischen den beiden ebenen Wellen wird also durch den Faktor $\pm (-1)^r \exp \{ -i \varphi_h \}$ bestimmt.

nären Teils ist dadurch verursacht, daß hier der Zeitfaktor $\exp \{ -2\pi i v_0 t \}$, dagegen bei LAUE $\exp \{ -2\pi i v_0 t \}$, benutzt wird [vgl. I. Teil, (A 19)].

Die durch (92) gegebene Phase der Funktion $F(\mathbf{r})$ kann man als die Phase der Welle mit dem Wellenvektor \mathbf{k} betrachten, wie die Formel (15) zeigt. Die Phase der anderen Welle mit dem Wellenvektor $\mathbf{k} + \mathbf{b}_h$ kann man daraus durch (107) bestimmen.

Aus (107) und der Normierungsbedingung der Blochschen Funktionen [Teil I, Gl. (21)]

$$\int_v (\boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}) d\mathbf{r} = v(|A_0|^2 + |A_h|^2) = 1, \quad (108)$$

kann man $|A_0|$ und $|A_h|$ bestimmen. Die Amplituden der beiden ebenen Wellen sind dann nach (3) $\exp\{S_1\}|A_0|$ und $\exp\{S_1\}|A_h|$.

Herrn Prof. Dr. K. MOLIÈRE danke ich für die Förderung dieser Arbeit und für zahlreiche Hinweise. Herrn Prof. Dr. N. KATO gilt mein Dank für wertvolle Diskussionen.

Anhang 1.

Strahlenoptik in der nicht-symmetrischen Form

Bei der Anwendung der Hamilton-Jakobischen Theorie auf die Eikonalgleichung (7) benutzt man üblicherweise (Ausnahmen: HAMILTON²², SYNGE²³, KLINE und KAY²⁴) nicht die im Text ausgeführte Parameterdarstellung, sondern man führt ein kartesisches Koordinatensystem x, y, z ein und geht zu einer nicht-symmetrischen Form über, indem man eine der Koordinaten, etwa z heraussondert (BORN-WOLF², COURANT-HILBERT³, CARATHÉODORY²⁵). In x, y, z symmetrische Formeln in der Parameterdarstellung lassen sich dann daraus leicht ableiten.

Hier werden nur die wichtigsten Formeln ohne Ableitung aufgezählt, und es wird auf die entsprechenden Gleichungen der Kap. A.1 u. 2 durch Nummern in eckigen Klammern hingewiesen. Zum Vergleich werden auch die entsprechenden Formeln des Buches von BORN und WOLF² (Appendix I) durch die Bezeichnung (BW 1) usw. zitiert.

Die Eikonalgleichung (7) lautet in kartesischen Koordinaten

$$v(k_x, k_y, k_z, x, y, z) = v_0, \quad (A1)$$

wobei

$$k_x = \frac{\partial S_0}{\partial x}, \quad k_y = \frac{\partial S_0}{\partial y}, \quad k_z = \frac{\partial S_0}{\partial z} \quad (A2)$$

einzusetzen ist. Man löst (A1) nach k_z auf in der Form [7] (BW 21)

$$k_z = -H(k_x, k_y, x, y; z). \quad (A3)$$

Dies ist die Hamilton-Jakobische Gleichung mit der Hamiltonschen Funktion $H(k_x, k_y, x, y; z)$. Die kanonischen Gleichungen lauten [9], [13] (BW 40)

$$dx/dz = \partial H / \partial k_x, \quad dy/dz = \partial H / \partial k_y, \quad (A4)$$

und [10], [14] (BW 40)

$$dk_x/dz = -\partial H / \partial x, \quad dk_y/dz = -\partial H / \partial y. \quad (A5)$$

Es folgt daraus [10], [14]

$$dk_z/dz = -dH/dz = -\partial H / \partial z, \quad (A6)$$

sowie [15] (BW 41)

$$S_0(z) - S_0(z_0) = \int_{z_0}^z \left(k_x \frac{dx}{dz} + k_y \frac{dy}{dz} - H \right) dz. \quad (A7)$$

Durch Legendresche Transformation geht man von k_x, k_y zu den Variablen [18], [6] (BW 38)

$$x' \equiv dx/dz = \partial H / \partial k_x, \quad y' \equiv dy/dz = \partial H / \partial k_y \quad (A8)$$

über und bildet mit Hilfe der daraus gewonnenen Funktionen [19]

$$k_x = k_x(x', y', x, y; z), \quad k_y = k_y(x', y', x, y; z) \quad (A9)$$

die Lagrangesche Funktion [23] (BW 37)

$$L(x', y', x, y; z) = k_x \frac{\partial H}{\partial k_x} + k_y \frac{\partial H}{\partial k_y} - H. \quad (A10)$$

(A7) erhält dann die Form (BW 1)

$$S_0(z) - S_0(z_0) = \int_{z_0}^z L dz. \quad (A11)$$

Durch die Umkehrung [25] (BW 13)

$$k_x = \partial L / \partial x', \quad k_y = \partial L / \partial y' \quad (A12)$$

und [26] (BW 38)

$$\begin{aligned} \partial H / \partial x &= -\partial L / \partial x, & \partial H / \partial y &= -\partial L / \partial y, \\ \partial H / \partial z &= -\partial L / \partial z \end{aligned} \quad (A13)$$

entstehen dann aus (A4) und (A5) die Lagrangeschen Gleichungen [24] (BW 7a, b)

$$\frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial x'} = \frac{\partial L}{\partial x}, \quad \frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial y'} = \frac{\partial L}{\partial y}. \quad (A14)$$

²² The Mathematical Papers of Sir W. R. HAMILTON, Vol. I, Geometrical Optics Cambridge Univ. Press, Cambridge 1931.

²³ J. L. SYNGE, Geometrical Mechanics and de Broglie Waves, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1954.

²⁴ M. KLINE u. I. W. KAY, Electromagnetic Theory and Geometrical Optics, Interscience Publishers, New York 1965.

²⁵ C. CARATHÉODORY, Geometrische Optik, Springer-Verlag, Berlin 1937.

Die kanonischen Gln. (A4) und (A5) sind die Euler-Lagrangeschen Gleichungen des Variationsproblems für das Integral (A7) in der kanonischen Form, wobei x , y und k_x , k_y variiert werden. Durch

die obige Legendresche Transformation erhält man das Variationsproblem für das Integral (A11) in der normalen Form. Die Euler-Lagrangeschen Gleichungen dieses Problems sind die Gln. (A14).

Anhang 2. Berechnung der Größe $\delta\nu$

Die Größe $\delta\nu$ ist nach Teil I, Gln. (93) und (78) gegeben durch

$$\delta\nu = \frac{c^2}{4\pi^2} \frac{1}{2\nu_0} \int_v (\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})^* \int_{\mathbf{r}'} [\mathbf{A}^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}', \mathbf{k})] d\mathbf{r}') d\mathbf{r}. \quad (\text{A15})$$

Ersetzt man den Tensor \mathbf{A}^A durch den Skalar $u_1(\mathbf{r})$, so erhält man

$$\delta\nu = \frac{c^2}{4\pi^2} \frac{1}{2\nu_0} \int_v (\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})^* u_1(\mathbf{r}) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})) d\mathbf{r}. \quad (\text{A16})$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ die Lösung der Wellengleichung (1) mit $u(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$

$$(2\pi\nu_0/c)^2 \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \text{rot rot } \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + u_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}). \quad (\text{A17})$$

Durch Einsetzen der Fourier-Entwicklung

$$u_1(\mathbf{r}) = \sum_n u_{1n} \exp\{2\pi i(\mathbf{b}_n \mathbf{r})\} \quad (\text{A18})$$

entsteht aus (A16)

$$\delta\nu = \frac{c^2}{4\pi^2} \frac{1}{2\nu_0} \sum_n u_{1n} \int_v (\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})^* \exp\{2\pi i(\mathbf{b}_n \mathbf{r})\} \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{k})) d\mathbf{r}. \quad (\text{A19})$$

Das Integral auf der rechten Seite kann man nach der Methode berechnen, die von WAGNER¹⁰ für die Auswertung des gemittelten Poynting-Vektors (31) verwendet wurde:

Wir betrachten eine Funktion $u_{\mathbf{r}1}(\mathbf{r})$, die aus $u_{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$ durch eine kleine Variation der Fourier-Koeffizienten $u_{\mathbf{r}n}$ hervorgeht

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{r}1}(\mathbf{r}) &= \sum_n (u_{\mathbf{r}n} + \delta u_{\mathbf{r}n}) \exp\{2\pi i(\mathbf{b}_n \mathbf{r})\} \\ &= u_{\mathbf{r}} + \sum_n \delta u_{\mathbf{r}n} \exp\{2\pi i(\mathbf{b}_n \mathbf{r})\}. \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

Wenn wir den Wert von \mathbf{k} vorgeben, müssen die Schwingungszahl und die Blochsche Funktion auch etwas abgeändert werden, um die Wellengleichung (A17) zu erfüllen:

$$\nu_1 = \nu_0 + \sum_n \delta u_{\mathbf{r}n} \frac{\partial \nu}{\partial u_{\mathbf{r}n}}, \quad \boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\beta} + \sum_n \delta u_{\mathbf{r}n} \frac{\partial \boldsymbol{\beta}}{\partial u_{\mathbf{r}n}}. \quad (\text{A21, 22})$$

Es gilt also

$$(2\pi\nu_1/c)^2 \boldsymbol{\beta}_1 = \text{rot rot } \boldsymbol{\beta}_1 + u_{\mathbf{r}1} \boldsymbol{\beta}_1. \quad (\text{A23})$$

Aus der Gl. (A17), die von $\boldsymbol{\beta}^*$ auch erfüllt wird, und Gl. (A23) folgt

$$\begin{aligned} (2\pi/c)^2 (\nu_1^2 - \nu_0^2) (\boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}_1) &= (\boldsymbol{\beta}^* \text{rot rot } \boldsymbol{\beta}_1) - (\boldsymbol{\beta}_1 \text{rot rot } \boldsymbol{\beta}^*) + (\boldsymbol{\beta}^* (u_{\mathbf{r}1} - u_{\mathbf{r}}) \boldsymbol{\beta}_1) \\ &= -\text{div} \{ [\boldsymbol{\beta}^* \text{rot } \boldsymbol{\beta}_1] - [\boldsymbol{\beta}_1 \text{rot } \boldsymbol{\beta}^*] \} + (\boldsymbol{\beta}^* (u_{\mathbf{r}1} - u_{\mathbf{r}}) \boldsymbol{\beta}_1). \end{aligned} \quad (\text{A24})$$

Bei Integration dieser Gleichung über eine Elementarzelle gibt das erste Glied auf der rechten Seite keinen Beitrag, weil es sich um die Divergenz eines periodischen Vektors handelt. Mit Berücksichtigung der Normierung von $\boldsymbol{\beta}$ [s. Gl. (108)] erhält man näherungsweise

$$0 = \sum_n \delta u_{\mathbf{r}n} \left[\left(\frac{2\pi}{c} \right)^2 2\nu_0 \frac{\partial \nu}{\partial u_{\mathbf{r}n}} - \int_v (\boldsymbol{\beta}^* \exp\{2\pi i(\mathbf{b}_n \mathbf{r})\} \boldsymbol{\beta}) d\mathbf{r} \right]. \quad (\text{A25})$$

Diese Gleichung soll für beliebige, kleine Werte von δu_{rn} erfüllt sein. Es folgt daher für jeden Index n

$$\int_v (\boldsymbol{\beta}^* \exp \{2\pi i (\mathbf{b}_n \mathbf{r})\} \boldsymbol{\beta}) d\mathbf{r} = \left(\frac{2\pi}{c}\right)^2 2\nu_0 \frac{\partial \nu}{\partial u_{rn}}. \quad (\text{A } 26)$$

Einsetzen in (A 19) liefert
$$\delta \nu = \sum_n u_{in} \frac{\partial \nu}{\partial u_{rn}}. \quad (\text{A } 27)$$

Anhang 3. Die Funktion $\nu(\mathbf{f}, \mathbf{r})$ für den Zweistrahlfall

Beim Zweistrahlfall setzt man voraus, daß die Blochsche Funktion aus zwei ebenen Wellen besteht [vgl. (2)]:

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{f}) = \mathfrak{U}_0 \exp \{2\pi i (\mathbf{f} \mathbf{r})\} + \mathfrak{U}_h \exp \{2\pi i (\mathbf{f} + \mathbf{b}_h, \mathbf{r})\}. \quad (\text{A } 28)$$

Für die Bestimmung von ν , \mathfrak{U}_0 und \mathfrak{U}_h bleiben von dem System von Gln. (7) im I. Teil nur zwei Gleichungen übrig (mit $\mathbf{f} = \mathbf{f}_0$, $\mathbf{f} + \mathbf{b}_h = \mathbf{f}_h$)

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \mathfrak{U}_0 &= -4\pi^2 [\mathbf{f}_0 [\mathbf{f}_0 \mathfrak{U}_0]] + u_0 \mathfrak{U}_0 + u_h \mathfrak{U}_h, \\ \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \mathfrak{U}_h &= -4\pi^2 [\mathbf{f}_h [\mathbf{f}_h \mathfrak{U}_h]] + u_0 \mathfrak{U}_h + u_h \mathfrak{U}_0. \end{aligned} \right\} \quad (\text{A } 29)$$

Dieses System von Vektorgleichungen läßt sich leicht in zwei voneinander unabhängige Systeme von Komponentengleichungen separieren. Man führt hierzu die „Strahlenebene“ ein, in der die Vektoren \mathbf{f}_0 und \mathbf{f}_h liegen. Im einen System erscheinen nur die zur Strahlenebene senkrechten, im anderen nur die zu ihr parallelen Komponenten der Vektoren \mathfrak{U}_0 und \mathfrak{U}_h . Wir nennen das erste System das der senkrechten, das zweite das der parallelen Polarisation. Mit Berücksichtigung der stets gut erfüllten Bedingung $4\pi^2 \nu^2 / c^2 \gg u$ kann man zeigen, daß im fraglichen Gebiet von \mathbf{f} [s. (45), (46)] die Gln. (A 29) für beide Fälle die Form

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 A_0 &= (4\pi^2 |\mathbf{f}_0|^2 + u_0) A_0 + (-1)^\tau C u_h A_h, \\ \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 A_h &= (4\pi^2 |\mathbf{f}_h|^2 + u_0) A_h + (-1)^\tau C u_h A_h \end{aligned} \right\} \quad (\text{A } 30)$$

hat, wobei A_0 und A_h für senkrechte Polarisation die zur Strahlenebene senkrechten Komponenten von \mathfrak{U}_0 bzw. \mathfrak{U}_h , für parallele Polarisation die zur Strahlenebene senkrechten Komponenten von $\text{rot } \mathfrak{U}_0$ bzw. $\text{rot } \mathfrak{U}_h$ bedeuten. Bei LAUE¹¹ (S. 319ff.) wird \mathfrak{U} durch \mathfrak{D} , $\text{rot } \mathfrak{U}$ durch \mathfrak{S} vertreten.

C ist gegeben durch (48) und (LAUE¹¹, S. 338)

$$\tau = \begin{cases} 1 & \text{für parallele Polarisation und } \vartheta_B > \pi/4, \\ 0 & \text{für sonstige Fälle.} \end{cases} \quad (\text{A } 31)$$

Die Lösbarkeitsbedingung von (A 30) ist durch (47) gegeben.

Anhang 4.

Die effektive Masse des Elektrons im Zweistrahlfall der Elektronenbeugung

Für die Elektronenbeugung bekommt man aus der Schrödinger-Gleichung

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \psi + V\psi, \quad (\text{A } 32)$$

die die Wellengleichung (1) ersetzt, die Gl. (47) in der Gestalt

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{f}|^2 + V_0 - E\right) \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{f} + \mathbf{b}_h|^2 + V_0 - E\right) - |V_h|^2 = 0, \quad (\text{A } 33)$$

wobei V_0 und V_h die Fourier-Koeffizienten von V sind.

Die Eikonalgleichung lautet

$$E_0 = E(\mathbf{f}, \mathbf{r}) \quad (\text{A } 34)$$

mit $\mathbf{f} = \nabla_{\mathbf{r}} S_0. \quad (\text{A } 35)$

Mit Berücksichtigung des Zeitfaktors

$$\exp \{-2\pi i E_0 t / \hbar\}$$

setzt man (s. Teil I, § 7)

$$S_0(t, \mathbf{r}) = S_0(\mathbf{r}) - E_0 t / \hbar \quad (\text{A } 36)$$

und erhält die kanonischen Gleichungen

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} E, \\ \frac{d\mathbf{f}}{dt} &= -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{f}} E.\end{aligned}\quad (\text{A37})$$

Gl. (A33) liefert mit den Annahmen (50) und (54)

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\hbar}{m} \left(k_x + \frac{b}{2} \right) \left[1 \pm \frac{B}{\left[1 + \left(\frac{2B}{b} \right)^2 \left(k_x + \frac{b}{2} \right)^2 \right]^{1/2}} \right], \quad (\text{A38})$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{\hbar}{m} k_y, \quad \frac{dz}{dt} = \frac{\hbar}{m} k_z, \quad (\text{A39})$$

wobei
$$B = \frac{\hbar^2}{m} \frac{b^2}{2|V_h|}. \quad (\text{A40})$$

Diese Größe beträgt für einen typischen Fall

$$b = 1 \text{ \AA}^{-1}, \quad |V_h| = 1 \text{ Volt}$$

etwa 75 ($\hbar^2/(2m) = 150,4 \text{ Volt \AA}^2$). Da $B \gg 1$, kann man (A38) in der Form schreiben:

$$\frac{dx}{dt} = \pm B \frac{\frac{\hbar}{m} \left(k_x + \frac{b}{2} \right)}{\left[1 + \left(\frac{2B}{b} \right)^2 \left(k_x + \frac{b}{2} \right)^2 \right]^{1/2}}. \quad (\text{A41})$$

Durch Einführung der Impulskomponenten

$$p_x = \hbar \left(k_x + \frac{b}{2} \right), \quad p_y = \hbar k_y, \quad p_z = \hbar k_z, \quad (\text{A42})$$

und des Tensors der effektiven Masse m^* nach

$$\mathbf{v} = m^* d\mathbf{r}/dt, \quad (\text{A43})$$

Wir entwickeln $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ an einem Punkt \mathbf{r}_p

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}(\mathbf{r}_p) + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla) \mathbf{v} + \dots \quad (\text{A47})$$

Das lokale Idealgitter (I. Teil, § 3) definieren wir hier, indem wir die Reihe (A 47) nach dem zweiten Glied abbrechen und in (A45) einsetzen:

$$u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) = \bar{u}(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{r}_p) - (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla) \mathbf{v}). \quad (\text{A48})$$

Wie man leicht sieht, bedeutet $\mathbf{v}(\mathbf{r}_p)$ eine parallele Verschiebung und $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla) \mathbf{v}$ eine homogene Deformation des Gitters. Aus (A46) folgt

$$u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) = \sum_n \bar{u}_n \exp \{ 2\pi i (\bar{\mathbf{b}}_n, \mathbf{r}_p - \mathbf{v}(\mathbf{r}_p)) \} \exp \{ 2\pi i (\bar{\mathbf{b}}_n, \mathbf{r} - \mathbf{r}_p - (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla) \mathbf{v}) \}. \quad (\text{A49})$$

Wenn wir ansetzen

$$u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) = \sum_n u_{np} \exp \{ 2\pi i (\bar{\mathbf{b}}_{np}, \mathbf{r} - \mathbf{r}_p) \}, \quad (\text{A50})$$

wobei

$$u_{np} = \bar{u}_n \exp \{ 2\pi i (\bar{\mathbf{b}}_n, \mathbf{r}_p - \mathbf{v}(\mathbf{r}_p)) \}, \quad (\text{A51})$$

erhält man die Komponenten von m^* :

$$\begin{aligned}m_{xx}^* &= \pm \frac{m}{B} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{2m}{\hbar b} \frac{dx}{dt} \right)^2 \right]^{1/2}}, \\ m_{yy}^* &= m_{zz}^* = m, \\ m_{yz}^* &= m_{zx}^* = m_{xy}^* = 0.\end{aligned}\quad (\text{A44})$$

Die effektive Masse des Elektrons weicht also von der normalen skalaren Masse m nur im Falle der Komponente m_{xx}^* ab. m_{xx}^* ändert sich formal relativistisch mit dx/dt , wobei die maximale Geschwindigkeit durch $\hbar b/(2m)$ gegeben ist.

Anhang 5.

Der Verschiebungsvektor und der reziproke Gittervektor im verzerrten Gitter

Wir definieren den Verschiebungsvektor $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ und den reziproken Gittervektor $\mathbf{b}_n(\mathbf{r})$ für zwei typische Modelle des verzerrten Gitters, nämlich das Modell der deformierbaren Ionen nach BLOCH²⁶ und das Modell der starren Ionen nach NORDHEIM²⁷.

1. Das Modell der deformierbaren Ionen

Bei diesem Modell wird die Größe $u(\mathbf{r})$ in (1) durch

$$u(\mathbf{r}) = \bar{u}(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{r})) \quad (\text{A45})$$

gegeben, wobei $\bar{u}(\mathbf{r})$ den Idealkristall und $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ den Verschiebungsvektor darstellt. $\bar{u}(\mathbf{r})$ läßt sich als Fourier-Reihe darstellen:

$$\bar{u}(\mathbf{r}) = \sum_n \bar{u}_n \exp \{ 2\pi i (\bar{\mathbf{b}}_n, \mathbf{r}) \}. \quad (\text{A46})$$

²⁶ F. BLOCH, Z. Phys. **52**, 555 [1928].

²⁷ L. NORDHEIM, Ann. Phys. **9**, 607 [1931].

so erhalten wir mit der Identität

$$(\bar{b}_n, (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla) \mathbf{v}) = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p, \nabla (\mathbf{v} \bar{b}_n)) \quad (\text{A52})$$

die gesuchte Relation

$$\mathbf{b}_{np} = \bar{b}_n - \nabla (\mathbf{v} \bar{b}_n), \quad (\text{A53})$$

die bei diesem Modell als *exakt* erfüllt betrachtet wird.

2. Das Modell der starren Ionen

Wir nehmen einfachheitshalber an, daß nur ein Atom in einer Elementarzelle vorhanden ist.

Man setzt statt (A45) an:
$$u(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{a}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p), \quad (\text{A54})$$

wobei \mathbf{r}_p der Ort des p -ten Atomkerns, $u_{\mathbf{a}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)$ die für das Atom eigene, von der Atomverschiebung unabhängige Funktion sein soll.

Den Verschiebungsvektor führen wir durch die Beziehung

$$\mathbf{r}_p = \mathfrak{R}_p + \mathbf{v}(\mathfrak{R}_p) \quad (\text{A55})$$

ein, wobei \mathfrak{R}_p der Gittervektor des Idealgitters ist. Durch Interpolation kann aus $\mathbf{v}(\mathfrak{R}_p)$ eine Funktion $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ konstruiert werden. In der Nähe von $\mathbf{r} = \mathfrak{R}_p$ gilt

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}(\mathfrak{R}_p) + (\mathbf{r} - \mathfrak{R}_p, \nabla) \mathbf{v} + \dots, \quad (\text{A56})$$

wobei $\nabla \mathbf{v}$ nach der Wahl von der Interpolationsmethode etwas unterschiedliche Werte haben kann.

Wie bei (A48) brechen wir die Reihe (A56) nach dem zweiten Glied ab und definieren $u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)$ durch

$$\begin{aligned} u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) &= \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{a}}(\mathbf{r} - \mathfrak{R}_q - \mathbf{v}(\mathfrak{R}_p) - (\mathfrak{R}_q - \mathfrak{R}_p, \nabla) \mathbf{v}) \\ &= \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{a}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p - (\mathfrak{R}_q - \mathfrak{R}_p) - (\mathfrak{R}_q - \mathfrak{R}_p, \nabla) \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (\text{A57})$$

mit (A55). Wir können an die Stelle von $\mathfrak{R}_q - \mathfrak{R}_p$ erneut \mathfrak{R}_q einsetzen und schreiben

$$u_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) = \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{a}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p - \mathfrak{R}_q - (\mathfrak{R}_q, \nabla) \mathbf{v}). \quad (\text{A58})$$

Der Gittervektor \mathfrak{R}_q ist gegeben durch

$$\mathfrak{R}_q = q_1 \bar{a}_1 + q_2 \bar{a}_2 + q_3 \bar{a}_3, \quad (\text{A59})$$

wobei q_1, q_2, q_3 ganze Zahlen, $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ die Basisvektoren des Idealgitters sind. Da gilt

$$\mathfrak{R}_q + (\mathfrak{R}_q, \nabla) \mathbf{v} = q_1 (\bar{a}_1 + (\bar{a}_1, \nabla) \mathbf{v}) + q_2 (\bar{a}_2 + (\bar{a}_2, \nabla) \mathbf{v}) + q_3 (\bar{a}_3 + (\bar{a}_3, \nabla) \mathbf{v}) \quad (\text{A60})$$

stellt (A58) ein Gitter dar, dessen Basisvektoren durch

$$\mathbf{a}_{ip} = \bar{a}_i + (\bar{a}_i, \nabla) \mathbf{v} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (\text{A61})$$

gegeben sind. Die reziproken Gitterbasisvektoren sind daher näherungsweise bis auf die quadratischen Glieder von $\nabla \mathbf{v}$ gegeben durch

$$\mathbf{b}_{ip} = \bar{b}_i - \nabla (\mathbf{v} \bar{b}_i) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{A62})$$

wobei \bar{b}_i die reziproken Basisvektoren des Idealgitters sind. Es folgt daraus in diesem Fall *näherungsweise* Gl. (A53).

Anhang 6.**Effekt der Ortsabhängigkeit von C , u_0 und u_h längs eines Strahls**

Wenn man C , u_0 und u_h nicht als konstant betrachtet, erhält man mit Verwendung von (81) aus (75) statt (82)

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} \left[\frac{dx/dz}{\left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right] \\ &= \pm \frac{B}{C} \left(\tan^2 \vartheta_B \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \mp \frac{u_0}{|C| |u_h|} \frac{1}{u_0} \frac{\partial u_0}{\partial x} \\ & \quad - \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{1}{\tan \vartheta_B} \frac{dx}{dz} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \left\{ \frac{dx}{dz} \left(\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{1}{|u_h|} \frac{\partial |u_h|}{\partial z} \right) + \tan^2 \vartheta_B \left(\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{|u_h|} \frac{\partial |u_h|}{\partial x} \right) \right\}. \quad (\text{A } 63) \end{aligned}$$

Man weiß nun, daß B normalerweise von der Größenordnung 10^4 ist. Dagegen sind die Koeffizienten der Größen $(1/u_0) \partial u_0 / \partial x$, $(1/C) \partial C / \partial z$ usw. von der Größenordnung 1.

Nach der Näherung von Kap. B.1 erhält man aus (48) für parallele Polarisierung

$$C = \left| 1 - \frac{1}{2} \frac{c^2}{v_0^2} (b^2 + 2b \Delta b_x) \right|. \quad (\text{A } 64)$$

Deshalb ist mit (80) z. B.

$$\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{4 \sin^2 \vartheta_B}{\cos 2 \vartheta_B} \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}. \quad (\text{A } 65)$$

Dies ist von derselben Größenordnung wie der Faktor, mit dem auf der rechten Seite von (A 63) B/C multipliziert auftritt.

u_0 ist durch die Zahl der Atomelektronen in einer Elementarzelle bestimmt, und ändert sich deshalb mit der Gitterverzerrung kaum. Auch u_h kann sich bei niedrig indizierten Reflexen von normalen Gitterstrukturen nicht viel ändern.

Folglich kann man normalerweise die Glieder, die die Ableitungen von C , u_0 und u_h enthalten, in (A 63) weglassen.