

## Zur Berechnung optischer Konstanten von KBr aus Energieverlustmessungen

P. KEIL

Institut für Angewandte Physik der Universität Hamburg  
(Z. Naturforsch. 23 a, 336–337 [1968]; eingegangen am 5. Januar 1968)

From electron energy loss measurements optical constants may be computed in a wide energy range by means of a Kramers-Kronig-transform. As demonstrated by the example of KBr, the absorption coefficient calculated in this way agrees well with the structure of optical absorption spectra up to 21 eV.

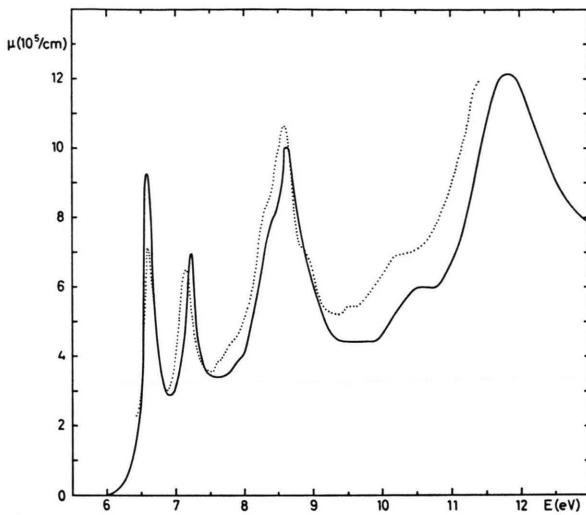


Abb. 1. Aus Energieverlusten an 50 keV-Elektronen berechneter Absorptionskoeffizient und (punktiert, in willkürlichen Einheiten) optisch gemessenes Absorptionspektrum von EBY, TEEGARDEN und DUTTON.

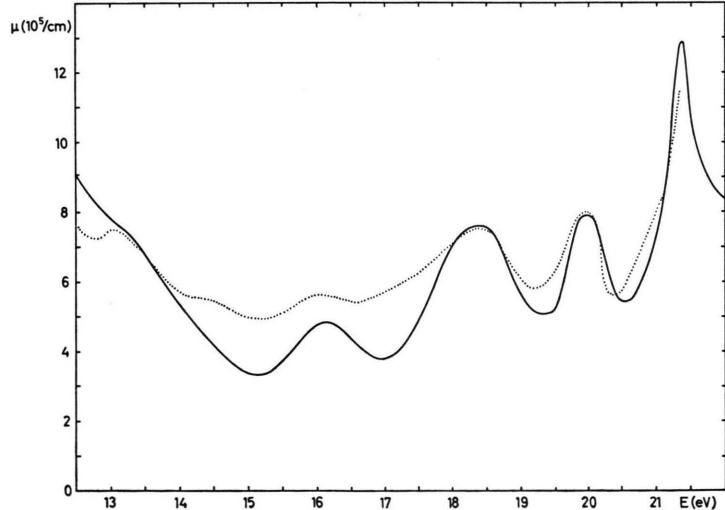


Abb. 2. Aus Energieverlustmessungen an 50 keV-Elektronen berechneter Absorptionskoeffizient und (punktiert, in willkürlichen Einheiten) optisch gemessenes Absorptionspektrum von METZGER und DUCKETT.

<sup>1</sup> H. R. PHILIPP u. H. EHRENREICH, Phys. Rev. **131**, 2016 [1963].

<sup>2</sup> D. M. ROESSLER, Brit. J. Appl. Phys. **17**, 1313 [1966].

<sup>3</sup> H. FRÖHLICH u. H. PELZER, Proc. Phys. Soc. London A **68**, 525 [1955].

<sup>4</sup> M. CREUZBURG, Z. Phys. **196**, 433 [1966].

<sup>5</sup> D. PINES, Elementary Excitations in Solids, Benjamin, New York, Amsterdam 1963.



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

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

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

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

wobei die Integration nur über den UV-Anteil erstreckt wird, wie er sich aus dem Energieverlustspektrum ergibt. Die Vernachlässigung des Infrarot-Anteils macht einen Fehler von wenigen Promille aus.  $\delta$  bezeichnet eine Energie, die klein ist gegenüber allen Energien, bei denen der UV-Beitrag von Null verschieden ist, jedoch groß gegen die Energie des Reststrahlloszillators. Das Verfahren läßt sich sinngemäß auf optische Absorptionsspektren übertragen.

Zur Berechnung des Integrals wurde die Energieverlustfunktion unterhalb 5.9 eV gleich Null gesetzt; oberhalb 38 eV wurde ein auch experimentell bestätigter Abfall mit  $1/E^3$  angenommen und die Integration geschlossen ausgeführt. Bei KBr ist  $\varepsilon_\infty = 2,33$ . Nach der Normierung wurde gemäß (1) aus  $\text{Im}(1/\varepsilon)(E)$  zunächst  $\text{Re}(1/\varepsilon)(E)$  berechnet. Aus beiden erhält man dann die optischen Konstanten. Bis 15 eV stimmen sie mit Daten, die von ROESSLER<sup>6</sup> aus optischen Reflexionsmessungen berechnet wurden, gut überein. Bei höheren Energien treten jedoch beträchtliche Abweichungen auf. Das gleiche Verhalten wurde auch beim Vergleich optisch<sup>1, 6</sup> und mit Elektronen bestimmter  $\text{Im } 1/\varepsilon$ -Werte<sup>4</sup> gefunden.

<sup>6</sup> D. M. ROESSLER, unveröffentlicht.

<sup>7</sup> J. E. EBY, K. J. TEEGARDEN u. D. B. DUTTON, Phys. Rev. **116**, 1099 [1959].

Zur Untersuchung dieser Abweichungen wurde aus unseren Daten der optische Absorptionskoeffizient  $\mu(E)$  berechnet und mit Originalmessungen verglichen. Quantitativ läßt sich der Vergleich jedoch nicht führen, da optische Messungen nur die Größe  $\mu D$  mit meist unbekannter Schichtdicke  $D$  ergeben. Die Gegenüberstellung des von uns aus Energieverlustmessungen an Elektronen berechneten Absorptionskoeffizienten und des von EBY, TEEGARDEN und DUTTON<sup>7</sup> gemessenen Absorptionsspektrums in Abb. 1 bestätigt die erwähnte Übereinstimmung bei niedrigen Energien. Wie Abb. 2 zeigt, besteht eine ähnlich gute Übereinstimmung unserer Werte mit Messungen von METZGER und DUCKETT<sup>8</sup> auch oberhalb 15 eV. Die Ursachen für die oben genannten Unterschiede sind demnach in den Meßwerten<sup>1, 6</sup> zu suchen.

Die vorliegenden Ergebnisse zeigen, daß das Energieverlustspektrum von Elektronen auch in diesem Energiebereich durch die Funktion  $-\text{Im}(1/\varepsilon)$  beschrieben werden kann und daß zur Berechnung optischer Konstanten auch Energieverlustmessungen herangezogen werden können.

Herrn Professor Dr. H. RAETHER danke ich herzlich für seine Anregung und Förderung dieser Arbeit.

<sup>8</sup> P. H. METZGER u. S. W. DUCKETT, Phys. Rev. **137**, A 953 [1965].

## Röntgenographische Korngrößenbestimmung an texturbefesteten grobkristallinen Stoffen

HORST EBEL und ALFRED WAGENDRISTEL  
Institut für Angewandte Physik der Technischen Hochschule  
Wien

(Z. Naturforsch. **23 a**, 337–338 [1968]; eingegangen am 22. August 1967)

Zur Korngrößenbestimmung an grobkristallinen Stoffen stehen mehrere Verfahren<sup>1–6</sup> zur Verfügung. Diese machen von der Interferenzpunktzählung auf den Beugungskreisen<sup>1–8</sup>, der Auswertung der Interferenzpunkt-abmessungen<sup>4</sup> und der statistischen Schwankung der gebeugten Intensität bei einer Probenbewegung<sup>5, 6</sup> Gebrauch. Von den genannten Möglichkeiten zur Korngrößenbestimmung sind jedoch nur zwei<sup>4, 6</sup> auf texturbefestete Proben anwendbar. Während die in<sup>6</sup> erörterte Berücksichtigung des Textureinflusses auch auf das Verfahren nach<sup>5</sup> übertragbar ist, steht für die Verfahren<sup>1–3</sup> ein quantitatives Korrekturverfahren aus. Die folgenden Ausführungen behandeln daher den Einfluß einer Vorzugsorientierung auf die nach den Interferenzpunktzählverfahren bestimmten Korngrößenwerte.

<sup>1</sup> R. A. STEPHEN u. R. J. BARNES, J. Inst. Metals **60**, 593 [1937].

<sup>2</sup> A. WAGENDRISTEL, H. EBEL u. K. BARTSCH, Z. Naturforsch. (im Druck).

<sup>3</sup> H. EBEL, Z. Met. **56**, 560 [1965].

Die bei senkrechter Inzidenz des Primärstrahles auf die Probenoberfläche am Debye-Scherrer-Kreis zu beobachtende Interferenzpunktzahl  $z$  beträgt

$$z = p \cdot V / \bar{v};$$

$p$  Wahrscheinlichkeit beugungsgünstiger Kristallitlagen,

$V$  vom einfallenden Strahl erfaßtes Probenvolumen,  
 $\bar{v}$  mittleres Kristallitvolumen.

Von diesem Grundgedanken ausgehend, ergibt sich die Korngröße  $G$  (nach<sup>1</sup>)

$$G = \sqrt[3]{\frac{p a^2 \pi \ln t_2/t_1}{4 Y \bar{\mu}}} ; \quad \bar{\mu} = \mu \cdot \left( 1 + \frac{1}{|\cos 2\Theta|} \right);$$

$t_2/t_1$  Verhältnis der Belichtungszeiten der für dieses Verfahren erforderlichen beiden Aufnahmen,

$a$  Kollimatordurchmesser,  
 $Y$  Differenz der Interferenzpunktzahlen desselben Beugungskreises auf den beiden Aufnahmen,

$\mu$  linearer Absorptionskoeffizient der verwendeten charakteristischen Strahlung im Probematerial.  
Das Verfahren in<sup>2</sup> führte zu einer Korngröße  $G$

$$G = \sqrt[3]{\frac{p a^2 \pi \ln 2}{4 Z \bar{\mu}}} .$$

<sup>4</sup> G. L. CLARK, Applied X-Rays, 4. Aufl. (1955), McGraw-Hill, New York, S. 682–686.

<sup>5</sup> B. E. WARREN, J. Appl. Phys. **31**, 2237 [1960].

<sup>6</sup> A. WAGENDRISTEL, H. EBEL u. F. LIHL, Z. Angew. Phys. **23**, 30 [1967].