Kristall und Technik | **13** | 9 | 1978 | 1131—1140

K. Scheerschmidt, S. Carl

Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie
der Akademie der Wissenschaften der DDR, Halle

Anwendung der Riemannschen Integrationsmethode auf Beugungsprobleme in Blochwellendarstellung[1])

Eine Transformation der Anregungsstärken der Blochwellen in der Formulierung des Elektronenbeugungskontrastes ohne Säulenapproximation ermöglicht die Anwendung der Riemannschen Integrationsmethode im Zweistrahlfall. Durch Präzisierung der Anfangsbedingungen und geeignete Wahl der Transformationskoeffizienten wird erreicht, daß die transformierten Anregungsstärken im ungestörten Kristall konstant sind.

A transformation of the excitation powers for the Bloch waves in the formulation of the electron diffraction contrast without column approximation allows the application of Riemann's integration method in the two-beam case. Using corrected initial conditions and suitable transformation coefficients one finds that the transformed excitation powers are constant within the nondisturbed crystal.

Numerische Berechnungen des elektronenmikroskopischen Beugungskontrastes von Humphreys und Drummonds unter Verwendung der Takagischen Gleichungen haben gezeigt, daß die Säulenapproximation für spezielle Anregungsbedingungen zu unbrauchbaren Ergebnissen führt: Kontrastberechnungen für diese speziellen Anregungsbedingungen verlangen deshalb eine rechnerische Behandlung der dynamischen Kontrasttheorie ähnlich der bei Röntgeninterferenzen verwendeten und die Methoden der Computersimulation des Elektronenbeugungskontrastes (siehe z.B. Lepski; Scheerschmidt) auf der Grundlage der Howie-Whelanschen bzw. Wilkensschen Differentialgleichungen sind in diesen Fällen nicht mehr verwendbar.

In der vorliegenden Arbeit wird zur Berechnung des Beugungskontrastes ohne Säulenapproximation die Riemannsche Integrationsmethode verwendet. Dabei wird jedoch nicht von den Takagischen Gleichungen ausgegangen (Takagi), wo die Elektronenwellenfunktion des Kristalls nach modifizierten ebenen Wellen mit ortsabhängigen Amplituden $\Phi_g(\boldsymbol{r})$ entwickelt wird:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{g}} \Phi_{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{r}) \cdot \exp\{2\pi i[(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g})\,\boldsymbol{r} - \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})]\}\,, \tag{1}$$

sondern von Gleichungen, die eine Darstellung der Wellenfunktion in Form von Blochwellen $b^l(\boldsymbol{r})$ mit ortsabhängigen Anregungsstärken $\varphi^l(\boldsymbol{r})$ benutzt (Wilkens):

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l} \varphi^l(\boldsymbol{r}) \cdot b^l(\boldsymbol{k}^l, \boldsymbol{r})$$

$$b^l(\boldsymbol{k}^l, \boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{g}} C^l_{\boldsymbol{g}} \exp\,(2\pi i[(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g}+\boldsymbol{\delta}k^l)\,\boldsymbol{r} - \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})]\}\,. \tag{2}$$

Der Vorteil der Blochwellendarstellung liegt darin begründet, daß die Anregungsstärken im perfekten Kristall (Verschiebungsfeld $\boldsymbol{u} = 0$) konstant sind — die Blochwellen sind die stationären Lösungen des perfekten Kristalls — und von den Anfangs-

werten nur in der Nähe eines Kristallbaufehlers wesentlich abweichen. In einem zweiten Teil zu dieser Arbeit (Carl und Scheerschmidt) wird, hiervon ausgehend, eine störungstheoretische Näherung durchgeführt.

Die Koeffizienten der Blochwellen $C_{\boldsymbol{g}}^{l}$ und die Unterschiede der Wellenvektoren der Blochwellen $\boldsymbol{\delta k}^{l} = \delta k^{l} \cdot \boldsymbol{n}$ sind die Eigenvektoren bzw. Eigenwerte der Grundgleichungen des perfekten Kristalls

$$C_{\boldsymbol{g}}^{l} \cdot [(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{\delta k}^{l})^2 - \boldsymbol{k}^2] = \sum_{\boldsymbol{h}} C_{\boldsymbol{h}}^{l} \cdot V_{\boldsymbol{g}-\boldsymbol{h}} \,. \tag{3}$$

Mit der von Wilkens angegebenen Näherung

$$|\Delta\{\varphi^{l}(\boldsymbol{r}) \cdot \exp[-2\pi i \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})]\}| \ll |4\pi(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{\delta k}^{l}) \times \\ \times \operatorname{grad}\{\varphi^{l}(\boldsymbol{r}) \exp[-2\pi i \varrho \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})]\}| \tag{4}$$

erhält man als Ausgangsgleichung für die Anregungsstärken im gestörten Kristall.

$$\sum_{l} \left[\frac{\partial \varphi^{l}}{\partial s_{\boldsymbol{g}}} - 2\pi i \varphi^{l} \frac{\partial(\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{u})}{\partial s_{\boldsymbol{g}}}\right] \cdot C_{\boldsymbol{g}}^{l} \cdot \exp[2\pi i(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{\delta k}^{l})\, \boldsymbol{r}] = 0 \,. \tag{5}$$

Hierbei beschreibt xyz ein kartesisches Koordinatensystem, wobei $z = 0$ die Folienoberseite und $z = t$ die Strahlaustrittsseite kennzeichnen, z somit der Oberflächennormalen $\boldsymbol{n}$ parallel ist. Die Koordinaten s_0, s_g werden in Richtung der Strahlen $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|$ bzw. $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{g}} = (\boldsymbol{k} + \boldsymbol{g})/|\boldsymbol{k} + \boldsymbol{g}|$ gelegt, wobei $\boldsymbol{k}$ der auf Refraktion korrigierte Wellenvektor der einfallenden ebenen Elektronenwelle und $w_{\boldsymbol{g}}$ den Abweichungsparameter darstellen. Die Größen $V_{\boldsymbol{g}}$ beschreiben das Kristallpotential und können durch die Extinktionslängen $\xi_{\boldsymbol{g}}$ bzw. die Absorptionsparameter $\xi'_{\boldsymbol{g}}$ ersetzt werden. Im folgenden wird vorausgesetzt, daß alle Größen im Kristallraum durch Division mit der kleinsten der Extinktionslängen $\xi_{\boldsymbol{g}}$ und alle Größen im reziproken Raum durch Multiplikation normiert werden und somit dimensionslos erscheinen.

Die Grundgleichungen (3) lassen sich näherungsweise als lineares Eigenwertproblem schreiben:

$$\sum_{\boldsymbol{g}'} (M_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}'} - \delta k^{j} \cdot \delta_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}'})\, C_{\boldsymbol{g}}^{j} = 0 \tag{6}$$

wobei $M_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}'}$ eine komplex symmetrische Matrix ist. Daraus lassen sich streng die Beziehungen

$$\sum_{l} C_{\boldsymbol{g}}^{l} C_{\boldsymbol{h}}^{l} = \delta_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{h}} \quad \text{und} \quad \sum_{\boldsymbol{g}} C_{\boldsymbol{g}}^{l} C_{\boldsymbol{g}}^{j} = \delta_{lj} \tag{7, 8}$$

ableiten, die nur im absorptionsfreien Fall mit den üblichen Orthogonalitätsrelationen übereinstimmen. In guter Näherung folgt weiterhin

$$M_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}'} \approx w_{\boldsymbol{g}} \delta_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}'} - \frac{V_{\boldsymbol{g}-\boldsymbol{g}'}}{2k_z} \,, \tag{9}$$

wobei $k_z = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{n} \approx |\boldsymbol{k}| = \lambda^{-1}$ gesetzt werden kann und daraus ergibt sich:

$$\sum_{l} \delta k^{j} C_{\boldsymbol{g}}^{l} C_{\boldsymbol{h}}^{l} = w_{\boldsymbol{g}} \delta_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{h}} + \frac{V_{\boldsymbol{g}-\boldsymbol{h}}}{2k_z} \,. \tag{10}$$

Um im folgenden eine Transformation der Anregungsstärken derart durchführen zu können, daß die Riemannsche Integrationsmethode anwendbar wird, wird die Näherung (4) nur im Kristallinneren als gerechtfertigt angesehen. Der von der Schrödingergleichung vorgeschriebene Sprung der zweiten Ableitung an den Folienoberflächen wird durch reflektierte ebene Wellen im Außenraum mit den Amplituden $\boldsymbol{r}_{\boldsymbol{g}}$ berücksichtigt:

Aus der Stetigkeit von ψ und $\partial\psi/\partial z$ an der Oberfläche und mit $k_{x,y}^{-} = k_{x,y}$, $k_z^{-} = -k_z$ folgt

$$\varphi^{l}|_{z=0} = C_0^{l} - \frac{\delta k^{l} C_0^{l}}{2k_z} \,, \quad r_{\boldsymbol{g}} = \frac{V_{\boldsymbol{g}}}{4(k_z)^2} \tag{12}$$

sowie

$$\left.\frac{\partial \varphi^{l}}{\partial z}\right|_{z=0} = \frac{\pi i}{2(k_z)^2} \cdot \sum_{\boldsymbol{g}} C_{\boldsymbol{g}}^{l} V_{\boldsymbol{g}} \cdot \left.\frac{\partial \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{u}}{\partial z}\right|_{z=0} .$$

Nur die auf diese Weise korrigierten Anfangswerte erfüllen exakt die Differentialgleichungen (5) und ermöglichen die nachfolgenden Transformationen.

Mit den Beziehungen (12) und der Transformation

$$\varphi^{i} = \sum_{j=1}^{n} f_{ij} \cdot h^{j} \,, \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{13}$$

lassen sich „neue Anregungsstärken" h^{i} definieren, für die ein im Zweistrahlfall separierfähiges Differentialgleichungssystem der Form

$$\frac{\partial h^{i}}{\partial s_{\boldsymbol{g}_i}} = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} h^{j} \tag{14}$$

angegeben werden kann. Die Koeffizienten A_{ij} folgen durch Einsetzen in die Blochwellengleichungen (5) und lassen sich schreiben:

$$A_{ij} = \frac{C_{\boldsymbol{g}_i}^{i} f^{j}}{C_{\boldsymbol{g}_j}^{j} f^{i}} \exp[2\pi i(\boldsymbol{\delta k}^{j} - \boldsymbol{\delta k}^{i})\, \boldsymbol{r}] \times \\ \times \left\{\left[2\pi i(w_{\boldsymbol{g}_j}\boldsymbol{n} - \boldsymbol{\delta k}^{j})\, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{g}_i} + 2\pi i \frac{\partial \boldsymbol{g}_i \boldsymbol{u}}{\partial s_{\boldsymbol{g}_i}} - \frac{1}{f^{j}} \frac{\partial f^{j}}{\partial s_{\boldsymbol{g}_i}}\right] \delta_{ij} + \pi i(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{g}_i}) \cdot \frac{V_{\boldsymbol{g}_i - \boldsymbol{g}_j}}{k_z}\right\} . \tag{15}$$

Dabei sind die Koeffizientenfunktionen $f^{i} = f_{ii}$ frei wählbar und unterliegen nur der Bedingung

$$\prod_{i=1}^{n} f^{i} \neq 0 \,, \tag{16}$$

während die Funktionen f_{ij} mit $i \neq j$ zur Gewährleistung der Darstellung (14) festgelegt sind zu

$$f_{ij} = f^{j} \cdot \frac{C_{\boldsymbol{g}_j}^{i}}{C_{\boldsymbol{g}_j}^{j}} \cdot \exp[2\pi i(\boldsymbol{\delta k}^{j} - \boldsymbol{\delta k}^{i})\, \boldsymbol{r}] \,. \tag{17}$$

Im Zweistrahlfall können die Akkürzungen $\boldsymbol{g}_1 = [000] \to 0$, $\boldsymbol{g}_2 \to g$, $\beta = \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{n}$, $\delta^0 = -\sigma(\boldsymbol{e}\boldsymbol{n})$, $\delta^{g} = -\sigma(\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{g}}\boldsymbol{n})$, $\sigma = \sqrt{(w)^2 + (\sigma_0)^2}$ sowie $\sigma_0 = 1 + i \cdot \xi_g/\xi'_g$ benutzt werden. Die neuen „Anregungsstärken" h_1 und h_2 lassen sich mit diesen Beziehungen in der Form

$$\left.\begin{aligned} h^{1} &= \frac{C_{g}^{2}}{f^{1}} \cdot \{C_0^{1}\varphi^{1} + \varphi^{2} \cdot C_0^{2} \cdot \exp[2\pi i(\delta k^{2} - \delta k^{1})\, z]\} \\ h^{2} &= \frac{C_0^{1}}{f^{2}} \cdot \{C_{g}^{2}\varphi^{2} + C_{g}^{1} \cdot \varphi^{1} \cdot \exp[2\pi i(\delta k^{1} - \delta k^{2})\, z]\} \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

schreiben. Damit können unter Verwendung von Gl. (12), (13) und (14) auch die Anfangswerte $h^{i}(z = 0)$, $h_{s_0}^{i}(z = 0)$ und $h_{s_g}^{i}(z = 0)$ festgelegt werden.

stattet. Die Separation liefert zwei voneinander unabhängige partielle hyperbolische Differentialgleichungen ($i = 1, 2$):

$$\frac{\partial^2 h^i}{\partial s_0 \partial s_g} + a^i \cdot \frac{\partial h^i}{\partial s_0} + b^i \frac{\partial h^i}{\partial s_g} + c^i h^i = 0 \tag{19}$$

mit den Koeffizienten:

$$\left.\begin{aligned} a^j &= \frac{f^j_{s_g}}{f^j} \mp 2\pi i \delta^g (C^j_0)^2 - 2\pi i \beta_{s_g} \\ b^j &= \frac{f^j_{s_0}}{f^j} \mp 2\pi i \delta^0 (C^j_g)^2 \\ c^j &= \frac{f^j_{s_0 s_g}}{f^j} \mp \frac{f^j_{s_g}}{f^j} 2\pi i \delta^0 (C^j_g)^2 \mp \frac{f^j_{s_0}}{f^j} 2\pi i \delta^g (C^j_0)^2 - 2\pi i \beta_{s_g} b^j - 2\pi i \beta_{s_0 s_g} \delta_{j2} \,. \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

Die Anwendung der Riemannschen Integrationsmethode auf die Gl. (19) liefert analog zu Takagi nur im perfekten Kristall analytische Lösungen. Durch das Auftreten frei wählbarer Funktionen in Gl. (19) wird jedoch die Anwendung der Störungsrechnung ermöglicht.

Wenn die Koeffizienten f^1 und f^2 in der Form

$$\left.\begin{aligned} f^1 &= \exp\left[2\pi i C^2_0 C^1_g (\delta k^1 - \delta k^2)\, z + 2\pi i \delta^g (C^2_0 C^1_g + C^2_g C^1_0)\, s_g\right] \\ f^2 &= \exp\left[2\pi i C^2_0 C^1_g (\delta k^2 - \delta k^1)\, z - 2\pi i \delta^0 (C^2_0 C^1_g + C^2_g C^1_0)\, s_0\right] \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

gewählt werden, dann erhält man nach einfacherjRechnung das Takagische Differentialgleichungssystem

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial^2 h^1}{\partial s_0 \partial s_g} - 2\pi i \beta_{s_g} \cdot \frac{\partial h^1}{\partial s_0} - q h^1 &= 0 \\ \frac{\partial^2 h^2}{\partial s_0 \partial s_g} - 2\pi i \beta_{s_g} \cdot \frac{\partial h^2}{\partial s_0} - (q + 2\pi i \beta_{s_0 s_g})\, h^2 &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{22}$$

mit

$$q = 4\pi^2 \delta^0 \delta^g C^1_0 C^2_0 C^1_g C^2_g = \text{const} \,.$$

Eine andere Wahl der Koeffizienten führt jedoch zu einem völlig andersgearteten Verhalten der neuen Anregungsstärken. Setzt man

$$\left.\begin{aligned} f^1 &= C^1_g \left\{ C^1_0 \left(C^2_0 - \frac{\delta k^1 C^2_0}{2k_z} \right) + C^2_0 \left(C^2_0 - \frac{\delta k^2 C^2_0}{2k_z} \right) \exp\left[2\pi i (\delta k^2 - \delta k^1)\, z\right] \right\} \\ \text{und} \\ f^2 &= C^1_0 \left\{ C^2_g \left(C^2_0 - \frac{\delta k^2 C^2_0}{2k_z} \right) + C^1_g \left(C^1_0 - \frac{\delta k^1 C^1_0}{2k_z} \right) \exp\left[2\pi i (\delta k^2 - \delta k^1)\, z\right] \right\} \end{aligned}\right\} \tag{23}$$

so werden die Koeffizienten c^i nur noch Funktionen von der Größenordnung der Störfunktion β_{s_g}:

$$\left.\begin{aligned} c^1 &= -2\pi i \beta_{s_g} \cdot b^1 \\ c^2 &= -2\pi i (\beta_{s_0 s_g} + \beta_{s_g} \cdot b^2) \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

sein.

Wie man leicht nachprüfen kann, wird auf diese Weise das Verhalten der Wellen-

ursprünglichen Anregungsstärken: Für $\beta \equiv 0$, d.h. den ungestörten Kristall gilt

$$h^i \equiv h^i(0) \equiv 1 \,. \tag{25}$$

Literatur

Carl, S., Scheerschmidt, K.: Kristall und Technik **13**, 1135 (1978)
Humphreys, C. J., Drummonds, R. A.: Electron Micr. 1976, Proc. 6. Europ. Congr. Electr. Micr., Jerusalem 1976, S. 142
Lepski, D.: Kristall und Technik **10**, 905 (1975)
Scheerschmidt, K.: in Schneider, G., Woltersdorf, J. (Edit.): Strukturen kristalliner Phasengrenzen — Elektronenmikroskopischer Bildkontrast, Leipzig 1976, S. 222
Takagi, S.: J. Physic. Soc. Japan **26**, 1239 (1969)
Wilkens, M.: phys. stat. sol. **6**, 939 (1964)

(Eingegangen am 20. Februar 1978)

Anschrift der Verfasser:
Dr. K. Scheerschmidt, Dipl.-Math. S. Carl
Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie
der Akademie der Wissenschaften der DDR, Halle
DDR-401 Halle
Weinberg

*

S. Carl, K. Scheerschmidt

Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie der Akademie der Wissenschaften der DDR, Halle

Näherungsverfahren für die Integraldarstellung von Beugungsintensitäten gestörter Kristalle[1])

Für die Berechnung des elektronenmikroskopischen Beugungskontrastes ohne Säulenapproximation wird eine Näherung in Form einer Störungsrechnung vorgeschlagen. Durch Anwendung auf den Zweistrahlfall ergeben sich für die Amplituden der gebeugten Wellen Integraldarstellungen.

For the calculation of the electron microscopic diffraction contrast without column approximation a solution is given by a perturbation calculation. Applying this to the two-beam case one gets integral representations for the amplitudes of the diffracted waves.

Wird im Fall der Blochwellenformulierung des Beugungskontrastes ohne Säulenapproximation eine Transformation der Anregungsstärken durchgeführt, dann ist auch in diesem Fall die Riemannsche Integrationsmethode anwendbar. Geht man von den entkoppelten Differentialgleichungen der dabei definierten „neuen An-

regungsstärken“ aus (Gl. (19) von Scheerschmidt und Carl), so können außerdem Näherungslösungen abgeleitet werden. Für diese Ableitung sind die in den Differentialgleichungen noch frei wählbaren Funktionen f^i so zu bestimmen, daß eine hinreichend gute Näherung erhalten wird und gleichzeitig eine Riemannsche Funktion des genäherten Problems angegeben werden kann.

Zur Durchführung der Näherung ist der Lösungsansatz

$$h^i = h^{i0} + Q^i \tag{1}$$

geeignet, wenn h^{i0} dem Wesen nach die Lösung des ungestörten Problems darstellt und die Störung nur noch über die frei wählbaren Funktionen f^i enthält

$$\left.\begin{aligned} h^{10} &= \frac{c_g^2}{f^1}\left[c_0^1\left(c_0^1 - \frac{\delta k^1 c_0^1}{2k_z}\right) + c_0^2\left(c_0^2 - \frac{\delta k^2 c_0^2}{2k_z}\right)\cdot \exp\left(2\pi i(\delta\boldsymbol{k}^2 - \delta k^1)\,\boldsymbol{r}\right)\right]\\ h^{20} &= \frac{c_0^1}{f^2}\left[c_g^2\left(c_0^2 - \frac{\delta k^2 c_0^2}{2k_z}\right) + c_g^1\left(c_0^1 - \frac{\delta k^1 c_0^1}{2k_z}\right)\cdot \exp\left(2\pi i(\delta\boldsymbol{k}^1 - \delta\boldsymbol{k}^2)\,\boldsymbol{r}\right)\right]. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

Damit werden die h^{i0} äquivalent zu $\varphi^i(0)$ und beschreiben den perfekten Kristall.

Den Einfluß der Störung beschreiben im wesentlichen die Funktionen Q^i. Nach Einsetzen von (1) in die Differentialgleichungen für die h^i erhält man:

$$Q^i_{s_0 s_g} + a^i Q^i_{s_0} + b^i Q^i_{s_g} + c^i Q^i = (2\pi i\beta_g b^i + 2\pi i\delta_{i2}\beta_{g0})\,h^{i0} + 2\pi i\beta_g h^{i0}_{s_0}\,. \tag{3}$$

Mit der Definition

$$\beta(s_0, s_g) = \tilde\beta(s_0, s_g) + \bar\beta(s_g),\quad \beta_g = \beta_{s_g},\quad \beta_0 = \beta_{s_0},\quad \beta_{g0} = \beta_{s_g s_0} \tag{4}$$

sowie der Näherung

$$|a_i - 2\pi i\bar\beta_g| \gg |2\pi i\tilde\beta_g| \tag{5}$$

und der Festlegung der frei wählbaren Funktion f^i so, daß

$$2\pi i\tilde\beta_g b_i + 2\pi i\delta_{i2}\tilde\beta_{g0} = 0 \tag{6}$$

gilt, erhält man die genäherten Differentialgleichungen

$$Q^i_{s_0 s_g} + (a_i - 2\pi i\bar\beta_g)\,Q^i_{s_0} + b_i Q^i_{s_g} + (c_i - 2\pi i\bar\beta_g b_i)\,Q^i = 2\pi i\beta_g h^{i0}_{s_0} + 2\pi i\bar\beta_g b_i h^{i0}\,. \tag{7}$$

Hierbei sind die Koeffizienten a_i aus den Koeffizienten a^i (siehe Gl. (21) von Scheerschmidt und Carl) ableitbar und schreiben sich:

$$\left.\begin{aligned} a_i &= \frac{f^i_{s_g}}{f^i} + q_1^i = a^i + 2\pi i\beta_g\\ b_i &= \frac{f^i_{s_0}}{f^i} + q_2^i = b^i\\ c_i &= \frac{1}{f^i}(f^i_{s_0 s_g} + f^i_{s_g}\cdot q_2^i + f^i_{s_0}\cdot q_1^i) = c^i + 2\pi i\beta_g b^i + 2\pi i\delta_{i2}\beta_{g0}\\ q_1^{1,2} &= -2\pi i\delta^g c_0^{1,2} c_g^{2,1}\\ q_2^{1,2} &= 2\pi i\delta^0 c_0^{2,1} c_g^{1,2}\,. \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

Mit der Substitution

$$Q^i = z^i\cdot\exp(-F^i) \tag{9}$$

wobei $F^i_{s_0} = b_i$ und $F^i_{s_g} = a_i - 2\pi i\bar\beta_g$ die Integrabilitätsbedingungen für die Funktionen F^i erfüllen, ergeben sich Differentialgleichungen mit bekannter Riemannscher

Anfangswerte von der Größenordnung 10^{-4} (siehe Gl. (12) von Scheerschmidt und Carl) wieder vernachlässigt, so erhält man

$$z^i(0) = z^i_{s_0}(0) = z^i_{s_g}(0) = 0 \tag{10}$$

und als Lösung

$$z^i(P) = 2\pi i \iint_V \exp\left(F^i(s_0, s_g)\right)\cdot J_0\left(\sqrt{-4q(s_0 - s_0^0)\,(s_g - s_g^0)}\right)\left(\beta_g(s_0, s_g)\,h^{i0}_{s_0}(s_0, s_g) + \right.$$
$$\left. + \bar\beta_g(s_g)\,b_i(s_0, s_g)\cdot h^{i0}(s_0, s_g)\right) ds_0\,ds_g\,. \tag{11}$$

Bei Berücksichtigung der korrigierten Anfangswerte enthält z^2 ein zusätzliches Linienintegral entlang der Oberfläche.

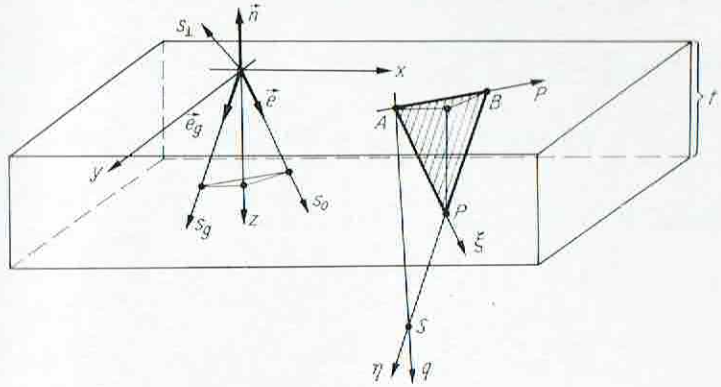

Fig. 1. Zur Festlegung der globalen und lokalen Koordinatensysteme (siehe Text) (P lies p)

Figur 1 zeigt die verwendeten Koordinatensysteme. Dem kartesischen Koordinatensystem x, y, z der Kristallfolie wird das ortsfeste Koordinatensystem s_0, s_g, $s_\perp$ der Strahlrichtungen einbeschrieben, wobei $s_\perp$ orthogonal zu s_0 und s_g gewählt wird. Die ξ, η-Koordinaten sind lokale, auf das Integrationsdreieck $\Delta\ ABP$ mit dem Aufpunkt P bezogene, Koordinaten. Die Beziehungen zwischen den Koordinatensystemen lauten:

$$\left.\begin{aligned} x &= s_0 e_x + s_g e_{gx} + s_\perp e_{\perp x}\\ y &= s_0 e_y + s_g e_{gy} + s_\perp e_{\perp y}\\ z &= s_0 e_z + s_g e_{gz} + s_\perp e_{\perp z} \end{aligned}\right\} \qquad \text{sowie} \qquad \left.\begin{aligned} \xi &= s_0 - s_0^0\\ \eta &= s_g - s_g^0 \end{aligned}\right\} \tag{12, 13}$$

wobei

$$\boldsymbol{e} = (e_x, e_y, e_z)\,,\qquad \boldsymbol{e}_g = (e_{gx}, e_{gy}, e_{gz}) \approx \frac{\boldsymbol{e} + \boldsymbol{g}/k_z}{|\boldsymbol{e} + \boldsymbol{g}/k_z|}$$

und

$$\boldsymbol{e}_\perp = (e_{\perp x}, e_{\perp y}, e_{\perp z}) = \frac{\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{e}_g}{|\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{e}_g|}\,.$$

Die Koordinaten des Aufpunktes sind

$$P = (x_p, y_p, t) = (s_0^0, s_g^0, s_\perp^0)\,. \tag{14}$$

Im ξ, η-System schreiben sich die Punktkoordinaten

$$P = (0, 0)\,,\qquad A = (-\mu_1, 0)\,,\qquad B = (0, -\mu_2)$$

Zwischen den Lösungen (11) und den Anregungsstärken φ^i besteht der einfache Zusammenhang:

$$\varphi^{1,2}(P) = \varphi^{1,2}(0) + \exp(2\pi i\bar{\beta}_g) \cdot \exp(-q_2^{1,2}s_0^0 - q_1^{1,2}s_g^0 \pm \delta^\perp s_\perp^0) \times \times \left[z^{1,2}(P) \cdot \exp(\mp 2\pi i \delta^\perp s_\perp) \mp z^{2,1}(P) \frac{c_0^2}{c_0^1} \right]. \tag{16}$$

Die Umrechnung in die Amplituden Φ_i der Darstellung der Wellenfunktion in ebenen Wellen erfolgt durch

$$\Phi_{\boldsymbol{g}_i}(\boldsymbol{r}) = \sum_l \varphi^l(\boldsymbol{r})\, c_{\boldsymbol{g}_i}^l \exp(\delta \boldsymbol{k}^l, \boldsymbol{r}) . \tag{17}$$

Damit erhält man eine Darstellung der Amplituden im lokalen Koordinatensystem ξ, η:

$$\left.\begin{aligned} \Phi_0(P) &= \Phi_0^{id}(P) - \frac{2\pi^2 i e_z \sigma_0^2}{\sigma} \exp\left(2\pi i \bar{\beta}_g(s_g^0)\right) \times \\ &\quad \times \iint_V \left[\exp\left(-2\pi i \bar{\beta}_\eta(s_g^0 + \eta)\right) \cdot \beta_\eta(s_0^0 + \xi, s_g^0 + \eta) \cdot E_1(\xi, \eta)\right] d\eta\, d\xi \\ \Phi_g(P) &= \Phi_g^{id}(P) - \exp\left(2\pi i \bar{\beta}_g(s_g^0)\right) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{2\pi\sigma_0}{\sigma} \iint_V \left[\exp\left(-2\pi i \bar{\beta}_\eta(s_g^0 + \eta)\right) \beta_{\eta\xi}(s_0^0 + \xi, s_g^0 + \eta) \times \right.\right. \\ &\quad \times E_1(\xi, \eta)\right] d\eta\, d\xi + e_z 2\pi^2 \sigma_0 \cdot \iint_V \left[\exp\left(-2\pi i \bar{\beta}_\eta(s_g^0 + \eta)\right) \times \\ &\quad \left.\left. \times \beta_\eta(s_0^0 + \xi, s_g^0 + \eta) \cdot E_2(\xi, \eta)\right] d\eta\, d\xi \right\} \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

wobei $\Phi_{0,g}^{id}$ die Amplituden des ungestörten Gitters beschreiben

$$\left.\begin{aligned} \Phi_0^{id}(t) &= \exp(i\pi w t)\left[\cos \pi\sigma t - i\frac{w}{\sigma}\sin \pi\sigma t\right] \\ \Phi_g^{id}(t) &= \exp(i\pi w t)\left[i\frac{\sigma_0}{\sigma}\sin \pi\sigma t\right] \end{aligned}\right\} \tag{19}$$

und $E_{1,2}$ vom Punkt P unabhängig sind und als Einflußfunktionen gedeutet werden können:

$$\left.\begin{aligned} E_1(\xi, \eta) &= J_0(2\pi\sigma_0 \sqrt{e_z e_{gz} \xi\eta}) \cdot \exp\left[i\pi w(t + e_z\xi - e_{gz}\eta)\right] \times \\ &\quad \times \sin \pi\sigma(t + e_z\xi + e_{gz}\eta) \\ E_2(\xi, \eta) &= J_0(2\pi\sigma_0 \sqrt{e_z e_{gz} \xi\eta}) \cdot \exp\left[i\pi w(t + e_z\xi - e_{gz}\eta)\right] \times \\ &\quad \times \left[\cos \pi\sigma(t + e_z\xi + e_{gz}\eta) + \frac{iw}{\sigma}\sin \pi\sigma(t + e_z\xi + e_{gz}\eta)\right]. \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

Ein optischer Eindruck von diesen Funktionen wird durch die Darstellung ihrer Beträge im Dreiecksgebiet Δ ABP anhand Figur 2[1]) vermittelt. Die Einflußfunktionen $E_{1,2}$

entsprechen den von Chukhovski und Indenbom für den Idealkristall abgeleiteten Funktionen und beschreiben wie dort die Ausbreitung einer lokalen Störung des Wellenfeldes. Im Unterschied zu der von Chukhovski und Indenbom gegebenen verbalen Erklärung wird hier der Einfluß des Störfeldes infolge des Kristalldefekts durch die Gleichungen (18) analytisch erfaßt.

Eine Darstellung der Amplitudenbeziehungen (18) im speziellen lokalen Koordinatensystem p, q (Abb. 1) mit

$$\left.\begin{aligned} p &= \frac{B_1}{2t}(e_z\xi - e_{gz}\eta + t); \qquad B_1 = \overline{AB} = \frac{t}{e_z e_{gz}}|e_{gz} - e_z| \\ q &= \frac{B_2}{2t}(e_z\xi + e_{gz}\eta + t); \qquad B_2 = \overline{AS} = \frac{t}{e_z e_{gz}}|e_{gz} + e_z| \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

ermöglicht es, den Einfluß der Säulenapproximation zu diskutieren:

$$\left.\begin{aligned} \Phi_0(P) &= \Phi_0^{id}(P) - \frac{i\pi\sigma_0^2}{2\sigma}\frac{(e_z e_{gz})^2}{(t)^3} B_1 B_2 \cdot \exp\left(2\pi i \bar{\beta}_g(s_g^0)\right) \times \\ &\quad \times \iint_V \exp\left(-\frac{2\pi i e_{gz} B_2}{t}\bar{\beta}_q\right) \cdot \left(B_2\frac{\partial}{\partial q} - B_1\frac{\partial}{\partial p}\right)\beta \cdot E_1\, dp\, dq \\ \Phi_g(P) &= \Phi_g^{id}(P) - \exp\left(\bar{\beta}_g(s_g^0) \cdot 2\pi i\right) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{\sigma_0}{\sigma}\frac{(e_z e_{gz})^2}{4(t)^4} B_1 B_2 \cdot \iint_V \exp\left(-\frac{2\pi i e_{gz} B_2}{t}\bar{\beta}_q\right) \times \right. \\ &\quad \times \left[(B_2)^2\frac{\partial^2}{\partial q^2} - (B_1)^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right]\beta \cdot E_1\, dp\, dq + 2\pi\sigma_0\frac{(e_z e_{gz})^2}{t^3} B_1 B_2 \times \\ &\quad \left. \times \iint_V \exp\left(-\frac{2\pi i e_{gz} B_2}{t}\bar{\beta}_q\right) \cdot \left(B_2\frac{\partial}{\partial q} - B_1\frac{\partial}{\partial p}\right)\beta \cdot E_2\, dp\, dq \right\}. \end{aligned}\right\} \tag{22}$$

Hiernach stellt sich die Säulenapproximation dar als Vernachlässigung des Terms $B_1\, \partial/\partial p\, \beta$ gegen $B_2\, \partial/\partial q\, \beta$, welches die Gültigkeit von $2\beta_p \ll \sin\theta_B\, \beta_q$ erfordert. Weiterhin muß die Möglichkeit einer Mittelwertbildung bezüglich der Koordinate p gewährleistet sein.

Die einzige Voraussetzung für die Gültigkeit der Näherungslösungen (18) bzw. (22) stellt die hinreichende Bedingung (5) dar. Für geradlinige Versetzungen, die parallel der Einstrahlrichtung verlaufen, gilt $\beta_0 \equiv \bar{\beta}_0 \equiv 0$, und somit ist die Abschätzung (5) trivialerweise erfüllt, und die Integralformeln (18) bzw. (22) sind in diesen Fällen die exakten Lösungen des Ausgangsproblems (3). Die Abschätzung (5) läßt sich in grober Weise weiter vereinfachen zu der hinreichenden Bedingung

$$|\beta_g| \ll \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\lambda^2}{a^2}\right)^{-1/2}, \tag{23}$$

welche für Versetzungen eine Gültigkeit der Näherung bis auf $\xi_g/10$ an den Ver-

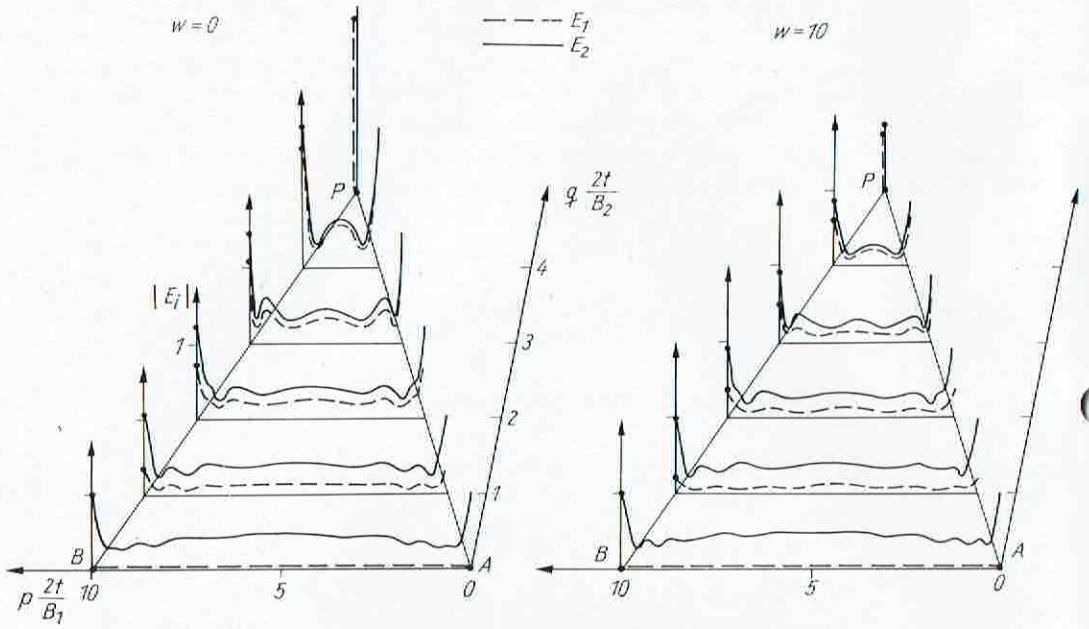

Fig. 2. Darstellung der Beträge der Einflußfunktionen E_1 bzw. E_2[1]) zur Veranschaulichung der Störungsausbreitung in Abhängigkeit von der Braggorientierung w bei einer angenommenen Absorption von $\xi_0'/\xi_g = 10$ und Dicke $t/\xi_g = 5$

Eine detaillierte Diskussion der benutzten Näherung und ihrer Bedeutung sowie die Anwendung der Integralformeln auf spezielle Beugungsprobleme bleiben weiteren Untersuchungen vorbehalten.

Literatur

Chukhovski, F. N., Indenbom, V. L.: in Brümmer, O., Stephanik, H. (Edit.): Dynamische Interferenztheorie, Leipzig 1976, S. 190

Scheerschmidt, K., Carl, S.: Kristall und Technik **13**, 1131 (1978)

(Eingegangen am 20. Februar 1978)

Anschrift der Verfasser:

Dr. K. Scheerschmidt, Dipl.-Math. S. Carl
Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie
der Akademie der Wissenschaften der DDR, Halle
DDR-401 Halle
Weinberg