

Interner Bericht
DESY F41
HASYLAB 83-01
JANUAR 1983

Eigentum der Property of	DESY	Bibliothek library
Zugang: Accessions:	17. MAI 1983	
Leihfrist: Loan period:	7	Tage days

STROBOSKOPISCHE RÖNTGENTOPOGRAPHIE AN SCHWINGQUARZEN

von

C.-C. Glüer

DESY behält sich alle Rechte für den Fall der Schutzrechtserteilung und für die wirtschaftliche Verwertung der in diesem Bericht enthaltenen Informationen vor.

DESY reserves all rights for commercial use of information included in this report, especially in case of filing application for or grant of patents.

“Die Verantwortung für den Inhalt dieses
Internen Berichtes liegt ausschließlich beim Verfasser“

STROBOSKOPISCHE RÖNTGENTOPOGRAPHIE AN SCHWINGQUARZEN

August 1982

Claus - Christian Glüer

Diplomarbeit in experimenteller Physik,
durchgeführt am
II. Institut für Experimentalphysik
der Universität Hamburg
im Hamburger Synchrotronstrahlungslabor
HASYLAB



Stroboscopic X-Ray Topography of Quartz Resonators

by

C.-C. Glüer

Abstract

The time structure of synchrotron radiation offers the possibility of imaging periodical processes in crystals with a time resolution of several nanoseconds. Experiments with quartz resonators carried out at the storage ring DORIS for the first time show the feasibility of a stroboscopic X-ray topography. Phase resolved images of acoustic bulk waves are presented where different side modes become visible which are covered up by the dominating thickness-shear mode on usual phase-integrated topographs. During each cycle also strong variations of dislocation images are observed. These contrast changes seem to be due to deflexions of the X-ray wave field in areas of inhomogenous strained lattice planes.

ABSTRACT

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde erstmalig die Zeitstruktur der Synchrotronstrahlung des Elektronenspeicherringes DORIS des Deutschen Elektronensynchrotrons DESY für eine im Nanosekundenbereich zeitaufgelöste Röntgentopographie genutzt.

Das in dieser Arbeit dargestellte und als stroboskopische Röntgentopographie bezeichnete Verfahren ermöglicht die phasenaufgelöste Abbildung periodischer Vorgänge in Kristallen, soweit diese elektrisch triggerbar sind und einen ausreichenden Röntgenkontrast liefern. Die Experimente dieser Arbeit betreffen piezoelektrisch angeregte akustische Volumenwellen in α -Quarz; ein Ausblick auf z.T. schon angelauene Versuche über andere abbildbare physikalische Vorgänge wird gegeben.

In den ersten drei Abschnitten werden die zur Interpretation der Topogramme notwendigen Grundlagen dargelegt. Abschnitt "Röntgentopographie" auf Seite 1 behandelt dabei die experimentellen Anordnungen und die theoretische Basis der Röntgentopographie, insbesondere die dynamische Theorie der Röntgenbeugung. Im Abschnitt "Quarz" auf Seite 33 werden die kristallografischen Begriffe und Daten zunächst allgemein für α -Quarz, dann auf den von uns untersuchten AT-Quarz spezialisiert, zusammengetragen. Der Abschnitt "Versetzungen" auf Seite 61 liefert die für die Interpretation der Versetzungskontraste notwendigen Kenntnisse.

Die im Abschnitt "Ergebnisse der Experimente" auf Seite 85 wiedergegebenen Topogramme und Auswertungen betreffen zwei Themen. Zum ersten die stroboskopische Abbildung akustischer Schwingungsmoden, insbesondere von thickness - shear Schwingungen und deren nur bei stroboskopischer Betrachtung sichtbaren Nebenmoden und zum zweiten die Darstellung der sich während einer Schwingungsperiode drastisch ändernden Versetzungskontraste. Diskutiert wird die Frage, ob deren Ursache tatsächliche Bewegungen der Versetzungen sind oder ob es sich um röntgenographische Intensitätsumlenkungen aufgrund der akustischen Schwingung handelt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen die stroboskopische Röntgentopographie als geeignete Methode zur phasenaufgelösten Abbildung akustischer Schwingungen in Kristallen; die beobachteten Versetzungskontraständerungen deuten auf eine Umlenkung der Wellenfelder im Kristall hin, wobei zu prüfen sein wird, ob dieses Verhalten im Rahmen der dynamischen Theorie erklärbar ist.

INHALT

RÖNTGENTOPOGRAPHIE	1
1.0 EXPERIMENTELLE GRUNDLAGEN	1
1.1 Von der Laue-Methode zur Röntgentopographie	1
1.2 Drei grundsätzliche experimentelle Anordnungsmöglichkeiten	3
1.2.1 Die Berg-Barrett-Methode	3
1.2.2 Die Lang-Methode	4
1.2.2.1 Sektionstopogramme	4
1.2.2.2 Projektionstopogramme	6
1.2.3 Die Doppelkristallmethode	6
1.2.4 Vergleichender Überblick über die Eigenschaften dieser Methoden	7
1.3 Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung	8
1.3.1 Stroboskopische Röntgentopographie	10
1.3.1.1 Die Zeitstruktur von Synchrotronstrahlung	10
1.3.1.2 Versuchsaufbau	10
1.3.1.3 Möglichkeiten der stroboskopischen Röntgentopographie	13
2.0 THEORETISCHE GRUNDLAGEN DER RÖNTGENTOPOGRAPHIE	14
2.1 Kinematische Theorie	14
2.2 Dynamische Theorie	15
2.2.1 Grundzüge der Theorie für den perfekten Kristall	15
2.2.1.1 Komplexe physikalische Größen	16
2.2.1.2 Das Konzept der Dispersionsfläche	18
2.2.1.3 Physikalische Bedeutung der Dispersionsfläche	21
2.2.2 Grundzüge der Theorie bei Gitterverzerrungen	23
2.2.2.1 Ausbreitung von Wellenfeldern im schwach deformierten Kristallgitter	25
2.2.2.2 Versetzungskontraste	29
QUARZ	33
3.0 ALLGEMEINE GRUNDLAGEN	33
3.1 Die kristallographische Struktur von α -Quarz	33
3.1.1 Die Bindung	33
3.1.2 Struktur der Einheitszelle	34
3.1.3 Kristallgittersymmetrien	37
3.1.4 Netzebenenabstände	38
3.2 Kristallgitterdynamik	38
3.2.1 Elastische Konstanten	38
3.2.1.1 Isotrope elastische Kontinuumstheorie	38
3.2.1.2 Anisotrope elastische Kontinuumstheorie	39
3.2.1.3 Nichtlinearitäten und Dämpfungsterme	41

3.2.2 Piezoelektrische Konstanten	41
4.0 DER AT-QUARZ	43
4.1 Der AT-Schnitt	43
4.1.1 Die AT-Schnitt Orientierung	43
4.1.2 Koordinatentransformation	44
4.2 Orientierungen von Ebenen und Vektoren im AT-Quarz	45
4.2.1 Kristallografische Ebenen	45
4.2.2 Primitive Vektoren	45
4.3 Indizierung des AT-Quarz Laue-pattern	47
4.4 Gitterdynamik des AT-Quarzes	53
4.4.1 Schwingungsformen	53
4.4.1.1 Die Grundmode	53
4.4.1.2 Die Nebenmoden	55
4.4.2 Schwingungsgleichung in AT-Quarz	56
4.4.2.1 Allgemeine Gleichung	56
4.4.2.2 Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz	57
VERSETZUNGEN	61
5.0 ALLGEMEINE GRUNDLAGEN	61
5.1 Die Entstehung des Konzeptes von Versetzungen	61
5.1.1 Die erste Diskrepanz : Die Röntgen-Reflektivität	61
5.1.2 Die zweite Diskrepanz : Das Scherverhalten	61
5.1.3 Das Lösungskonzept : Stufen- und Schraubenversetzungen	63
5.2 Versetzungsstatik im Kristallgitter	64
5.2.1 Elementare Geometrie von Versetzungen	64
5.2.1.1 Der Burgers-Vektor	64
5.2.1.2 Endpunkte von Versetzungen	66
5.2.1.3 Richtung des Burgers-Vektors in Bezug auf die Versetzungsrichtung	66
5.2.1.4 Aufspaltung einer Versetzung	67
5.2.2 Selbstenergie einer Versetzung	67
5.2.2.1 Der Kern einer Versetzung	67
5.2.2.2 Die Selbstenergie der Umgebung	70
5.2.2.3 Die Selbstenergie des Kernes	71
5.3 Versetzungsdynamik im Kristallgitter	72
5.3.1 Gleitebenen	72
5.3.2 Versetzungsbewegung durch Anlegen einer äußeren mechanischen Spannung	73
5.3.3 Gleiten im Gitter: Darstellung des Konzeptes der Peierls-Barriere	76
5.3.4 Weitere Hinweise zu Bewegungsmöglichkeiten von Versetzungen	77

6.0	VERSETZUNGEN IN α -QUARZ	78
6.1	Vorbemerkung zu bisherigen Untersuchungen	78
6.2	Gleitebenen-Systeme in α -Quarz	79
	ERGEBNISSE DER EXPERIMENTE	85
7.0	CHARAKTERISIERUNG AUSGEWERTETER REFLEXE	86
7.1	Braggwinkel	86
7.1.1	Definition der Braggwinkel-Komponenten	86
7.1.2	Berechnung der θ -Winkel aus den Topogrammen	89
7.1.2.1	Bragg-Winkelbestimmung bei konstanter Kristalldicke	89
7.1.2.2	Braggwinkelbestimmung bei variierender Kristalldicke	89
7.1.2.3	Berechnung der Winkel zweier Reflexe	93
7.2	Zusammenstellung wichtiger physikalischer Größen	94
8.0	ABBILDUNG VON AKUSTISCHEN SCHWINGUNGEN	97
8.1	Projektionstopogramme	97
8.1.1	Phasenintegrierte Aufnahmen	97
8.1.2	Stroboskopische Aufnahmen	101
8.2	Sektionstopogramme	104
8.2.1	Phasenintegrierte Aufnahmen	104
8.2.2	Stroboskopische Aufnahmen	106
8.2.2.1	Die thickness-shear - Schwingungsmoden	106
8.2.2.2	Nebenmoden	107
8.3	Resumée betreffend die Abbildung akustischer Schwingungen	112
9.0	RAÜMLICHE LAGE VON VERSETZUNGEN	114
9.1	Unbewegte Versetzungen	114
9.1.1	Herleitung der Berechnung der Ruhelage	114
9.1.2	Die Ruheposition dreier ausgewählter Versetzungen	120
9.2	Bewegte Versetzungen	126
9.2.1	Auswertung der Versetzungsbewegung unter Annahme kinematischer Kontraste	128
9.2.1.1	Herleitung der Bewegungsberechnung bei kinematischen Kontrasten	129
9.2.1.2	Die "Bewegung" dreier ausgewählter Versetzungen	131
9.2.2	Diskussion der Bewegungsergebnisse	134
9.2.3	Erklärungsansatz durch Strahlumlenkung	136
9.2.3.1	Darstellung der Strahlweges	137
9.2.3.2	Herleitung der Bewegungsberechnung bei Strahlumlenkung	138
9.2.3.3	Die "Bewegung" dreier ausgewählter Versetzungen	140
9.2.4	Diskussion der Bewegungsergebnisse	141
9.3	Folgerungen für weitere Experimente	143

A.0	PROGRAMM DISLREST	147
B.0	PROGRAMM FORMFAKT	152
	LITERATURVERZEICHNIS	157
	DANKSAGUNG	162

VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN

Abbildung 1. Experimentelle Anordnung der Laue-Methode	1	Abbildung 40. Elektrisches Feld im Quarz unter äußerem Feld	59
Abbildung 2. Laue-Diagramm eines AT-Quarzes (Bragg-Fall)	2	Abbildung 41. Potentialverlauf im Quarz unter äußerem Feld	59
Abbildung 3. Berg-Barrett Methode in Reflektions- und Transmissionsstellung	3	Abbildung 42. Zur Geometrie der Scherspannung	62
Abbildung 4. Experimentelle Anordnung der Lang-Methode	4	Abbildung 43. Darstellung einer Stufenversetzung im einfachen kubischen Gitter	63
Abbildung 5. Sektionstopogramm-Geometrie	5	Abbildung 44. Darstellung einer Schraubenversetzung im einfachen kubischen Gitter	64
Abbildung 6. Experimentelle Anordnung der Doppelkristall-Methode	7	Abbildung 45. Zur Definition des lokalen Burgers-Vektors	65
Abbildung 7. Skizze des Versuchsaufbaus	11	Abbildung 46. Darstellung einer Stufenversetzungsumgebung	68
Abbildung 8. Prinzip der stroboskopischen Röntgentopographie	12	Abbildung 47. Gitterverzerrung als Funktion des Abstandes von der Versetzung	68
Abbildung 9. Dispersionsfläche in der Übersicht	19	Abbildung 48. Darstellung einer Schraubenversetzungsumgebung	69
Abbildung 10. Dispersionsfläche im Detail	20	Abbildung 49. Darstellung einer Gleitebene für eine gebogene Stufenversetzung	72
Abbildung 11. Feldamplituden auf der Dispersionsfläche	21	Abbildung 50. Gleitbewegung einer Stufenversetzung	73
Abbildung 12. Separation der Energieflüsse bei Abweichung vom Bragg-Winkel	22	Abbildung 51. Gleitbewegung einer Stufenversetzung unter einer äußeren mechanischen Spannung	74
Abbildung 13. Sektionstopogramm-Intensitätsverteilung	23	Abbildung 52. Gleitbewegung einer Schraubenversetzung	75
Abbildung 14. Interbranch-scattering	28	Abbildung 53. Gleitbewegung einer Schraubenversetzung unter einer äußeren mechanischen Spannung	75
Abbildung 15. Bildung von Versetzungskontrasten	29	Abbildung 54. Gleitebenen-System \bar{a} -basal	81
Abbildung 16. Doppelkontrast des direkten Bildes einer Versetzung	30	Abbildung 55. Gleitebenen-System \bar{a} -prismatisch	81
Abbildung 17. Phasendiagramm der kristallografischen	33	Abbildung 56. Gleitebenen-System \bar{a} -pyramidal1	81
Abbildung 18. Quarz-Bindung in Form von SiO_2 -Tetraedern	34	Abbildung 57. Gleitebenen-System \bar{a} -pyramidal2	82
Abbildung 19. Darstellung der primitiven Basisvektoren	35	Abbildung 58. Gleitebenen-System \bar{c} -prismatisch1	82
Abbildung 20. Projektion der Einheitszelle in die 0001-Ebene	36	Abbildung 59. Gleitebenen-System \bar{c} -prismatisch2	82
Abbildung 21. Projektion des Quarz-Kristallgitters in die 0001-Ebene	37	Abbildung 60. Gleitebenen-System \bar{a} - \bar{c} -prismatisch	83
Abbildung 22. Darstellung einiger wichtiger Quarz-Schnitte	43	Abbildung 61. Gleitebenen-System \bar{a} - \bar{c} -pyramidal	83
Abbildung 23. Kristallografische Ebenen im Quarz	45	Abbildung 62. Darstellung der Bragg-Winkel Komponenten	88
Abbildung 24. Projektion der primitiven Basisvektoren	46	Abbildung 63. Darstellung der σ - Winkel	88
Abbildung 25. Projektion der reziproken primitiven Basisvektoren	46	Abbildung 64. $1\bar{2}2$ -Projektionstopogramm mit eingebettetem Sektions - Topogramm	91
Abbildung 26. Stereografische 0001-Standardprojektion von α -Quarz	47	Abbildung 65. $1\bar{2}2$ -Sektionstopogramm	91
Abbildung 27. Orientierungsmöglichkeiten eines senkrecht gestellten AT-Quarzes	48	Abbildung 66. $\bar{1}\bar{1}2$ -Projektionstopogramm mit eingebettetem Sektions - Topogramm	92
Abbildung 28. Die stereografische Projektion eines AT-Quarzes	49	Abbildung 67. $\bar{1}\bar{1}2$ -Sektionstopogramm	92
Abbildung 29. Graphisch konstruiertes AT-Quarz Laue-pattern (1)	51	Abbildung 68. Skizze eines rechteckigen AT-Quarzes	99
Abbildung 30. Laue-pattern eines AT-Quarzes	52	Abbildung 69. Projektionstopogramm eines rechteckigen AT-Quarzes in Ruheposition	99
Abbildung 31. $10\bar{1}$ -Reflex eines AT-Quarzes	52	Abbildung 70. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle	99
Abbildung 32. Face-shear vs. thickness-shear Schwingungsmode	53	Abbildung 71. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle	100
Abbildung 33. Nebenmoden-Kopplung rotierter Y-Schnitte	54	Abbildung 72. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der Nebenmoden der thickness-shear - Grundwelle	100
Abbildung 34. Temperaturkoeffizienten rotierter Y-Schnitte	54		
Abbildung 35. Die thickness-shear-Schwingungs-Mode	55		
Abbildung 36. Nebenmoden zur thickness-shear Grundmode	55		
Abbildung 37. Verschiebung im Quarz unter äußerem Feld	58		
Abbildung 38. Verzerrung im Quarz unter äußerem Feld	59		
Abbildung 39. 1. Ableitung der Verzerrung im Quarz unter äußerem Feld	59		

Abbildung 73. Stroboskopische Projektionstopogrammsequenz des 1.04 MHz-AT-Quarzes	102
Abbildung 74. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes im Nulldurchgang	103
Abbildung 75. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes 40 ns nach Nulldurchgang	103
Abbildung 76. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes 80ns nach Nulldurchgang	104
Abbildung 77. Skizze von Grund- und Oberwellen der thickness-shear - Schwingungsmode	105
Abbildung 78. Phasenintegriertes Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle	105
Abbildung 79. Phasenintegriertes Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle	105
Abbildung 80. Stroboskopisches Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle im Nulldurchgang	106
Abbildung 81. Stroboskopisches Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle nahe Maximum	106
Abbildung 82. Stroboskopisches Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Minimum	107
Abbildung 83. Stroboskopisches Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Maximum	107
Abbildung 84. Stroboskopisches Projektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Maximum	108
Abbildung 85. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden vor Nulldurchgang I	108
Abbildung 86. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden am Nulldurchgang I	109
Abbildung 87. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden nach Nulldurchgang I	109
Abbildung 88. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden vor Nulldurchgang II	109
Abbildung 89. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden am Nulldurchgang II	110
Abbildung 90. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden nach Nulldurchgang II	110
Abbildung 91. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden bei hoher Spannung	111
Abbildung 92. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden bei hoher Spannung	111
Abbildung 93. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden bei hoher Spannung	112
Abbildung 94. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden bei hoher Spannung	112
Abbildung 95. Zeichnung für Kristall- und Topogramm - Koordinaten	116

Abbildung 96. Darstellung der Berechnung der x- und z'-Komponente	117
Abbildung 97. Darstellung der Berechnung der y' - Komponente	118
Abbildung 98. Zur Bestimmung der Sektionstopogramm-Höhe	119
Abbildung 99. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{2}$ -Reflex	120
Abbildung 100. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{1}$ -Reflex	121
Abbildung 101. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{2}$ -Reflex, zweiter Punkt	123
Abbildung 102. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{1}$ -Reflex, zweiter Punkt	123
Abbildung 103. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{2}$ -Reflex, dritter Punkt	124
Abbildung 104. Versetzungen V1- V3 im $\overline{1}\overline{2}$ -Reflex, dritter Punkt	124
Abbildung 105. 3-dimensionale Darstellung der Versetzungen V1- V3	125
Abbildung 106. Projektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im Nulldurchgang	126
Abbildung 107. Projektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im schwingenden Quarz	126
Abbildung 108. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes in Ruheposition	127
Abbildung 109. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im schwingenden Quarz	127
Abbildung 110. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im schwingenden Quarz	128
Abbildung 111. Versetzungsschwingungsmoden	130
Abbildung 112. Sektionstopogramm zur Versetzungsbewegung am Beginn der positiven Halbwelle	132
Abbildung 113. Sektionstopogramm zur Versetzungsbewegung am Beginn der negativen Halbwelle	132
Abbildung 114. Kinematische Kontrastbewegung in zwei Sektionstopogrammen	136
Abbildung 115. Darstellung des umgelenkten Strahlweges	137
Abbildung 116. Darstellung des umgelenkten Strahlweges: Vertikalkomponente	138
Abbildung 117. Darstellung des umgelenkten Strahlweges: Horizontalkomponente	140

VERZEICHNIS DER TABELLEN

1. Eigenschaften von Röntgentopographie-Methoden	7
2. Vorteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung	8
3. Nachteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung	9
4. Standard AT-Laue-pattern	50
5. Gleitebenen in α -Quarz	79
6. Quarzdicke an verschiedenen Punkten	90
7. Braggwinkel der Ruheposition	93
8. Sektionstopogramm-Vermessung des schwingenden Quarzes	93
9. Braggwinkel des schwingenden Quarzes	94
10. Datenzusammenstellung für zwei Reflexe (σ -Polarisation)	96
11. Ruheposition von Versetzung V1 bis V3 (etwa in der Mitte der Versetzung)	121
12. Versetzungsbewegung in positiver und negativer Halbwelle	133
13. Versetzungskontrastbewegung im Vergleich zweier Reflexe	135
14. Kontrastverschiebung bei umgelenktem Strahl (experimentelle Daten)	141

RÖNTGENTOPOGRAPHIE

1.0 EXPERIMENTELLE GRUNDLAGEN

1.1 VON DER LAUE-METHODE ZUR RÖNTGENTOPOGRAPHIE

Die Röntgentopographie, insbesondere bei Nutzung von Synchrotronstrahlung, ist vom experimentellen Aufbau her der Laue-Methode¹, einer Methode zur Kristallstrukturbestimmung, sehr ähnlich. Deren Versuchsaufbau sei deshalb kurz beschrieben:

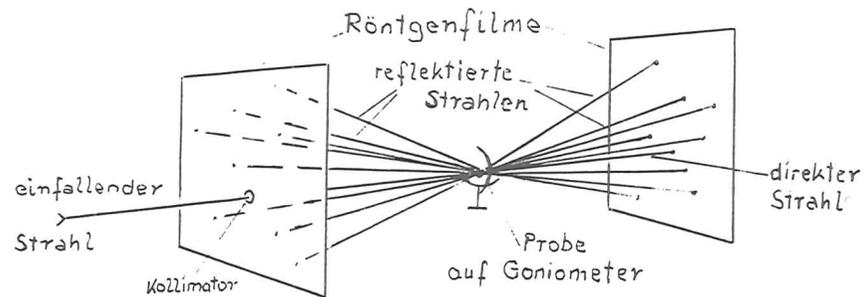


Abbildung 1. Experimentelle Anordnung der Laue-Methode

Ein einfallender Röntgenstrahl mit kontinuierlichem Spektrum durchläuft einen Kollimator und trifft auf den auf einem Goniometer montierten Kristall. Diejenigen Komponenten des Röntgenspektrums, für die in Bezug auf eine Kristall-Netzebene die Braggsche Gleichung

$$(1) \quad 2d \sin \theta = n \lambda \quad n = 1,2,3...$$

mit d = Netzebenenabstand, λ = Wellenlänge, θ = Einfallswinkel

¹ Erstes Experiment zur Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristallen durch Max von Laue 1913 (Laue, M. v., Friedrich, W., Knipping, P., Ann. Physik 41, 971 (1913))

erfüllt ist, werden reflektiert; dabei treten sie entweder auf der Rückseite des Kristalles² (Laue - Fall) oder auf der Vorderseite (Bragg - Fall) aus. Auf einem röntgenempfindlichen Film erhält man ein Laue - Diagramm, das in charakteristischer Weise Zonenkreise bestimmter Symmetrie aufweist, welche durch die Kristallstruktur bestimmt ist. Abbildung 2 zeigt beispielsweise ein derartiges Laue - Diagramm für einen AT-Quarz, in Bragg-Position aufgenommen, Abbildung 30 auf Seite 52 ist ein Beispiel für den Laue-Fall.

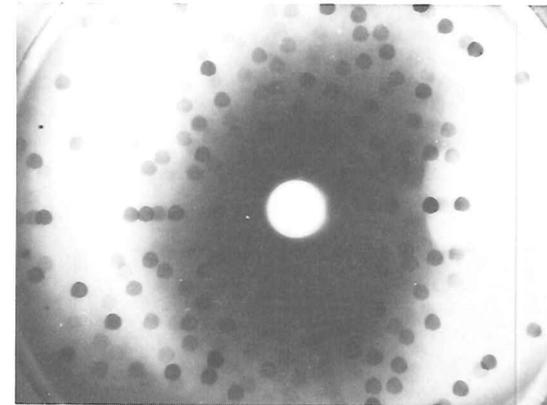


Abbildung 2. Laue-Diagramm eines AT-Quarzes (Bragg-Fall)

Wird der Kollimator nun entfernt so wird damit der gesamte Kristall zweidimensional projiziert auf den Film abgebildet. Wäre es ein perfekter planparalleler Kristall (d.h. keinerlei Fehlstellen, Versetzungen, Oberflächenverspannungen o. ä.), und vernachlässigte man Effekte an den Kanten des Kristalles, so würde jeder dieser Laue - spots gleichmäßig ausgeleuchtet erscheinen. Ist er es nicht, so bilden sich interne Kristallbaufehler, wie z.B. Stapelfehler und Versetzungen auf dem Film als Kontrast ab.

² jeweils auf die Strahlungsquelle bezogen

Röntgentopographie ist die Methode der Aufnahme, Untersuchung und Interpretation derartiger Reflexe zwecks Rückschluß' auf Art und Ort von Gitterfehlern im Volumen und an den Oberflächen eines Kristalles.

1.2 DREI GRUNDSÄTZLICHE EXPERIMENTELLE ANORDNUNGSMÖGLICHKEITEN

1.2.1 Die Berg-Barrett-Methode

Die von Berg³ und Barrett⁴ entwickelte experimentelle Anordnung ist durch eine ausgedehnte Röntgenquelle und eine kurze Probe - Film Distanz gekennzeichnet und wird hauptsächlich in Reflektionsstellung benutzt. Die Anordnung zeigt Abbildung 3⁵

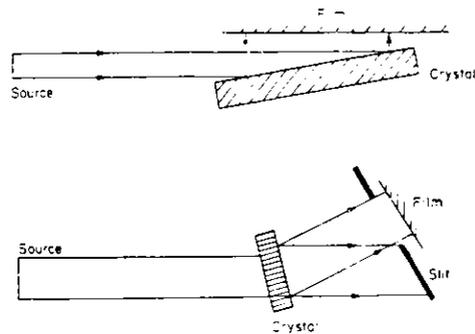


Abbildung 3. Berg-Barrett Methode in Reflektions- und Transmissionsstellung

Charakteristika der Methode⁶ sind :

- Auflösung hoher Versetzungsdichten
- einfache, unkritische Justierung durch breite Rocking-Kurve
- Unempfindlichkeit gegenüber Orientierungskontrast

³ Berg, W.F., Naturwissenschaften 19, 391 (1931)

⁴ Barrett, C.S., Trans. AIME 161, 15 (1945)

⁵ Quelle der Abbildung : Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S. 26

⁶ siehe auch Tab. 1 (S.7)

1.2.2 Die Lang-Methode

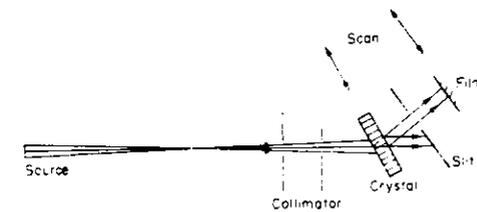


Abbildung 4. Experimentelle Anordnung der Lang-Methode

Diese an herkömmlichen Röntgenröhren bisher am häufigsten verwendete experimentelle Anordnung wurde von Lang⁷ entwickelt. Sie ist, wie in Abbildung 4 ersichtlich⁸, durch eine punktförmige Strahlungsquelle und die Benutzung in Transmissionsstellung gekennzeichnet⁹.

Prinzipiell gibt es zwei Aufnahmetechniken, die im folgenden ausführlich dargestellt werden sollen.

1.2.2.1 Sektionstopogramme

Abbildung 5 auf Seite 5¹⁰ zeigt schematisch, durch welche Strahlengeometrie das Abbild von Kristallausschnitt und Versetzung auf einem Film erzeugt wird¹¹.

⁷ Lang, A.R., Acta Cryst. 10, 839 (1957), Lang, A.R., J. Appl. Phys. 29, 597 (1958)

⁸ Quelle der Abbildung : Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S. 29

⁹ weitere Eigenschaften siehe Tab. 1 (S.7)

¹⁰ Quelle der Abbildung Authier, A.: Section Topography, in X-Ray Optics, Queisser, H.J., (ed.) Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1977 S. 147

¹¹ Es handelt sich hier um das sogenannte "direkte" Bild; weitere Bildtypen siehe "Versetzungskontraste" auf Seite 29.

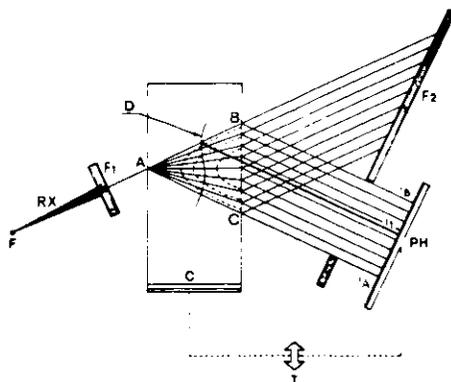


Abbildung 5. Sektionstopogramm-Geometrie

Der einfallende Strahl tritt bei A in den Kristall ein, wobei Wellenfelder in alle Richtungen zwischen der Einfall- (\vec{k}_0 entspr. \vec{AB}) und der Ausfall- (\vec{k}_t entspr. \vec{AC}) Richtung angeregt werden. Das Dreieck ABC bezeichnet man als Borrmann-Fächer. Die Hauptintensität verläuft jedoch weiterhin in Richtung \vec{k}_0 .

Trifft diese Welle nun auf die Versetzung am Punkt D, so wird von dieser Stelle aus ein großer Teil der Intensität in Richtung \vec{k}_t ausgesandt, welche nach Austritt aus dem Kristall auf dem Röntgenfilm PH das direkte Bild i_t ergibt. Die Punkte A und B werden nach i_A und i_B abgebildet¹²; aufgrund der mit Hilfe der dynamischen Theorie zu erklärenden in diesem Randbereich auftretenden erhöhten Intensität, die zu intensiven Begrenzungslinien des Sektionstopogrammes führt, nennt man diese Randbereiche auch "hot margins".

Vermittels des Abstandes von i_t zu den hot margins kann man sofort eine Aussage treffen, in welcher Tiefe des Kristalles die Versetzung liegt.

Ein Beispiel für ein Sektionstopogramm zeigt Abbildung 65 auf Seite 91

1.2.2.2 Projektionstopogramme

Nimmt man ein Sektionstopogramm nicht nur in einer Stellung auf, sondern führt man eine simultane Translation von Kristall und Film bei feststehender Strahlquelle derart aus, daß der Strahl den gesamten Kristall überstreicht, so erhält man auf dem Röntgenfilm ein Abbild aller Defekte im gesamten Volumen des Kristalles. Anstelle der Information über die Tiefe eines Punktes der Versetzungen im Kristall, die hierbei wegen der Verschmierung der hot margins verloren geht, gewinnt man ein projiziertes Abbild der gesamten Versetzung. Ein Beispiel für ein derartiges traverse pattern (insbesondere bei Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung als Projektionstopogramm bezeichnet) zeigt Abbildung 31 auf Seite 52.

Aus einer Zuordnung von einem Projektionstopogramm und mehreren Sektionstopogrammen (siehe Abbildung 64 auf Seite 91) kann man die gesamte dreidimensionale Position aller Versetzungen rückfolgern.

Vergleicht man die Berg-Barrett mit der Lang Methode, so entspricht der räumlichen Integration durch die ausgedehnte Quelle die zeitliche Integration durch die Traversierung.

Das Sektionstopogramm zeichnet sich durch Empfindlichkeit sowohl gegenüber Orientierungs- als auch Extinktionskontrast und deutlich geringeren Streuuntergrund aus.

1.2.3 Die Doppelkristallmethode

Bei der Doppelkristall-Topographie, entwickelt von Bond und Andrus¹³ sowie Bonse und Kappler¹⁴, werden - wie der Name schon sagt - zwei Kristalle benutzt, einer als Referenzkristall, einer als Probe, und zwar in einer Anordnung, wie sie Abbildung 6 auf Seite 7 zeigt¹⁵. Wenn die Probe leicht

¹² Im tatsächlichen Experimenten Aufbau ist die Strahlquelle meistens nicht punktförmig, sondern hat eine strichförmige Ausdehnung senkrecht zur Zeichenebene. Damit wird nicht nur ein Stich durch den Kristall, sondern ein Schnitt abgebildet.

¹³ Bond, W.L., Andrus, J., Am. Mineralogist 37, 622 (1952)

¹⁴ Bonse, U., Kappler, E., Z. Naturforschung 13a, 348 (1958)

¹⁵ Quelle der Abb.: Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S.48

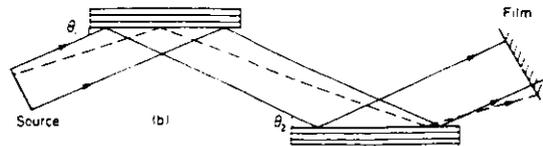


Abbildung 6. Experimentelle Anordnung der Doppelkristall-Methode

fehlorientiert von der exakten Parallelposition ist, so führen unter der Annahme schmaler Reflektionsbreiten bereits Verzerrungen von 10^{-8} bis 10^{-9} zu nachweisbaren Intensitätsänderungen im reflektierten Strahl.

1.2.4 Vergleichender Überblick über die Eigenschaften dieser Methoden

Die Leistungen der beschriebenen Versuchsaufbauten werden durch Tab. 1 charakterisiert¹⁸. Die Röntgentopographie allgemein erscheint mit ihrer Möglichkeit dicke Proben (mm) und große Flächen (cm²) zu untersuchen komplementär zur Transmissionselektronenmikroskopie, die als Vorteile die höhere Auflösung (über 1 μm hinaus) und die größere abbildbare Defektdichte (mehr als $10^8/\text{cm}^2$) aufweist.

	Berg-Barrett Transmission	Lang Sektions-Top.	Doppelkristall Transmission
Justierung	einfach	schwieriger	kompliziert
Bel.zeit(Röhre)	1 Stunde	10 Stunden	1 Stunde
Auflösung	1 μm	1 μm	1 μm
Kristall-Dicke	< 5 μm	0.1 - 5 mm	~ 300 μm
Versetzungsdichte	< $5 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^3$	< 10^5

Tabelle 1. Eigenschaften von Röntgentopographie-Methoden

¹⁸ Daten der Tabelle großenteils nach Bonse, U., Hart, M., Newkirk, J.B. : X-ray diffraction, in Encyclopaedic Dictionary of Physics, Supplementary Volume 1, Pergamon 1965

1.3 RÖNTGENTOPOGRAPHIE MIT SYNCHROTRONSTRAHLUNG

Gerade in Bezug auf die zwei Hauptnachteile der herkömmlichen Röntgentopographie, die Röntgenröhren benutzt, als da sind lange Belichtungszeiten und schwierige Justierung, brachte die erstmalig von Tuomi et al.¹⁷ benutzte Synchrotronstrahlung entscheidende Verbesserungen. Aufgrund der hohen Intensität verkürzte sich die Belichtungszeit von Stunden auf Sekunden und aufgrund des kontinuierlichen Spektrums genügt es bei der Weißlichttopographie im wesentlichen, den Kristall einfach in den Strahl zu positionieren : Jede Netzebene reflektiert die ihr - gemäß Braggscher Gleichung - zugehörige Wellenlänge (und Oberwellen) und bildet den Kristall auf einen Laue-Spot ab.

Aber nicht nur bisher vorhandene Nachteile der Röntgentopographie konnten abgebaut werden, vielmehr eröffneten die besonderen Eigenschaften der Synchrotronstrahlung eine Reihe völlig neuer Anwendungsgebiete. In Tab. 2 werden die wichtigsten Vorteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung zusammengestellt.

Vorteil	bedingt durch Eigenschaft
kürzere Belichtungszeit	hohe Intensität grosses Gesichtsfeld simultane Aufnahme mehrerer Reflexe
Probenorientierung problemlos : 1. homogene Ausleuchtung verkürzter Proben; 2. Abbildung beliebig orientierter Körner.	kontinuierliches Spektrum
hohe Auflösung	grosser Quellabstand

Tabelle 2. Vorteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung (Teil 1 von 2)

¹⁷ Tuomi, T., Naukkarinen, K., Rabe, P., Phys. Stat. Sol.(a) 25, 93 (1974)

Vorteil	bedingt durch Eigenschaft
komplexe Probenumgebung	grosser Filmabstand bei Wahrung hoher Auflösung wegen grossem Quellabstand
Kontrastverbesserung	Polarisation der Röntgenstrahlen
zeitaufgelöste Abbildung im Sekundenbereich	hohe Intensität
stroboskopische Abbildung periodischer Vorgänge im Nano- bis Mikrosekundenbereich	Zeitstruktur der Synchrotronstrahlung

Tabelle 2. Vorteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung (Teil 2 von 2)

Diesen Vorteilen stehen folgende Hauptnachteile gegenüber, die jedoch mit höherem experimentellen Aufwand wie angegeben überwunden werden können:

Nachteil	Abhilfe
höherer Streuuntergrund	reduzierbar durch Arbeiten im Vakuum und spezielles Kameradesign
Strahlengefährdung	Experimente im Strahlenschutz-Interlock mit Fernbedienung
Überlagerung höherer Harmonischer	Doppelkristall-Topographie, spez. Filtertechniken

Tabelle 3. Nachteile der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung

Insbesondere die Zeitstruktur der Synchrotronstrahlung war für unsere Experimente von essentieller Bedeutung und so soll dieser Punkt im nachfolgenden Abschnitt ausführlich erläutert werden.

1.3.1 Stroboskopische Röntgentopographie

Die in dieser Arbeit beschriebenen Experimente, die im Zeitraum September 1980 bis November 1981 im HAMBURGER SYNCHROTRONSTRALUNGS LABORATORIUM HASYLAB am Meßplatz Röntgentopographie durchgeführt wurden, nutzten erstmalig die Zeitstruktur der Synchrotronstrahlung zur stroboskopischen Abbildung periodischer Vorgänge in Kristallen.

1.3.1.1 Die Zeitstruktur von Synchrotronstrahlung

Synchrotronstrahlung entsteht als elektromagnetische Strahlung mit einem kontinuierlichen Spektrum vom Infrarotbereich bis hin zu harter Röntgenstrahlung bei der Beschleunigung von Elektronen auf einer ringförmigen Bahn mit nahezu Lichtgeschwindigkeit. In unserem Fall nutzen wir die Synchrotronstrahlung des Speicherringes DORIS am Deutschen Elektronensynchrotron DESY in Hamburg. Die im Speicherring umlaufenden Elektronen sind in sogenannten "bunches" gebündelt; eine relativistische Berechnung der Strahlungscharakteristik ergibt, daß die Hauptintensität der emittierten Strahlung in Vorwärtsrichtung bezgl. der Bewegung der Elektronen liegt. Diese Strahlung wird absorbiert, mit Ausnahmen an den Stellen, wo ein Eintrittsfenster zu einer "beamline" ein Austreten ermöglicht. Infolge der bunch-Struktur der Elektronen wird die Probe nur in bestimmten Zeitabständen von Röntgenstrahlung getroffen.¹⁸

Im Fall des sogenannten "single-bunch" Betriebsmodos von DORIS, bei dem nur einer von maximal 480 möglichen bunches im Ring umläuft, folgen Röntgenblitze von etwa 200 ps Dauer mit einer Wiederholfrequenz von 104097 MHz.

1.3.1.2 Versuchsaufbau

Abbildung 7 auf Seite 11 und Abbildung 8 auf Seite 12 zeigen eine Skizze des Versuchsaufbaus und eine Prinzipzeichnung der stroboskopischen Röntgentopographie. Zu Abbildung 7: Aufgrund der Intensität der Synchrotronstrahlung erfolgen alle Experimente in einer Bleihütte, die während des Versuches unzugänglich ist. Deshalb erfolgt die Steuerung der Filmpositionierung

¹⁸ Näheres über Synchrotronstrahlung findet sich in dem Buch Kunz, C., (ed.) Synchrotron Radiation, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York 1979

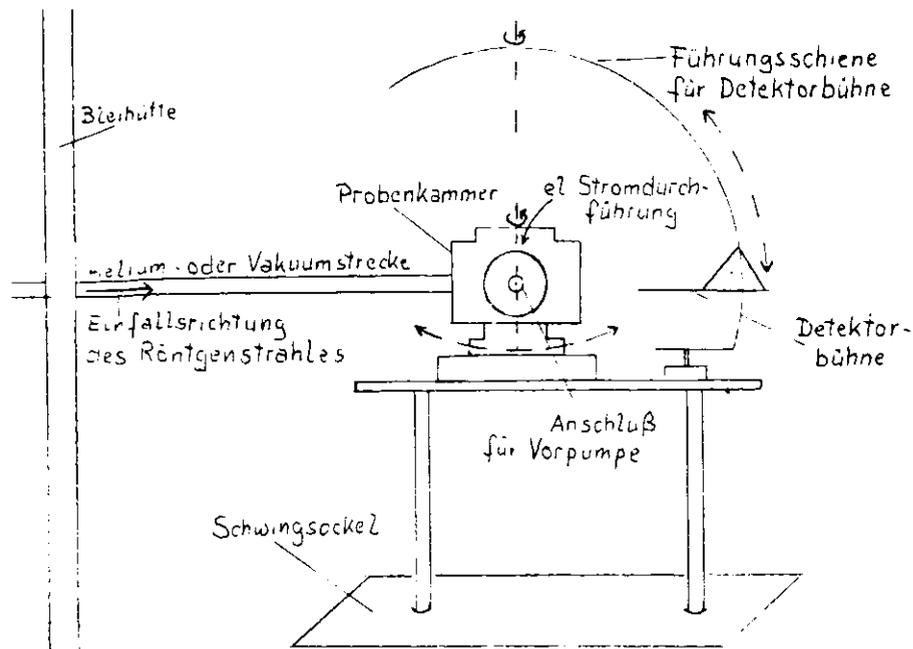


Abbildung 7. Skizze des Versuchsaufbaus

mit Hilfe der Detektorbühne durch Steuerung der letzteren durch Schrittmotoren von außen.

Zur Minimierung des Streuuntergrundes wurde der Kristall auf einem Goniometer in einer auf $\approx 10^{-2}$ Torr evakuierten Probenkammer montiert und aus demselben Grunde liegt der Strahlweg vor der Kammer ebenfalls in einem Vakuum- (oder Helium-) Rohr.

Typische Entfernungen sind 34 m für den Abstand von Strahlungsquelle zum Kristall und ein Abstand Probe - Film von 7 cm. Bei einer vertikalen Quellgröße von 3 mm ergäbe sich dafür eine maximal erzielbare vertikale Auflösung von $6 \mu\text{m}$.

Justieraufnahmen erfolgten unter Verwendung von Agfa Structurix IC Papier als Röntgenfilm, das in einer Entwicklungsmaschine in wenigen Sekunden entwickelbar ist; alle weiteren Aufnahmen wurden auf Kodak Industrex R Film gemacht, der eine maximale Auflösung von wenigen Mikrometern ermöglicht.

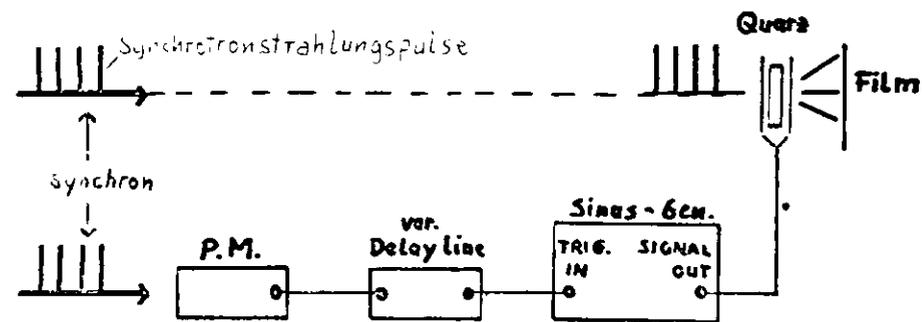


Abbildung 8. Prinzip der stroboskopischen Röntgentopographie

Zu Abbildung 8 : Als Probe untersuchten wir einen AT-Quarz^{19 20}, der exakt als Resonanzfrequenz die Wiederholfrequenz der Synchrotronstrahlungsquelle von 1.04097 MHz aufwies. Benutzte man zur getriggerten piezoelektrischen Anregung des Schwingquarzes nun ein Signal, das direkt an die bunches des Speicherringes gekoppelt war, so wurde dadurch gewährleistet, daß Röntgenblitz und mechanische Schwingung des Quarzes genau synchron erfolgten. Dieses Triggersignal wurde von einer der sogenannten bunch - Uhren von DORIS geliefert. Als bei dieser jedoch von Zeit zu Zeit unkontrollierbare Sprünge in der Phasenlage beobachtet wurden, wurde zur Kontrolle ein steter Vergleich zu einem weiteren Signal durchgeführt : dieses Signal wurde von einem schnellen Photomultiplier geliefert, der die optische Komponente der Synchrotronstrahlung am Meßstand HONORMI (ebenfalls in der HASYLAB Experimentierhalle) nachwies.

Die benutzte bunch - Uhr konnte gleichzeitig als variable delay-line benutzt werden; so ließ sich damit die relative Phasenlage von

¹⁹ Zur Erklärung, was unter einem AT-Quarz zu verstehen ist siehe "Die AT-Schnitt Orientierung" auf Seite 43

²⁰ Hergestellt von der Kristallverarbeitungsgesellschaft KVG Neckarbischofsheim.

Röntgenblitz zur elektrischen und damit auch mechanischen Schwingung variieren.

Beispielsweise wurde die Phasenlage so gewählt, daß die Röntgenblitze den Quarz stets in einem der beiden Nulldurchgänge trafen und durch Variation des delays in minimal 2ns - Schritten wurden dann sukzessive Aufnahmen vom ersten Nulldurchgang über das erste Maximum, über den zweiten Nulldurchgang und das zweite Maximum bis hin zum Ausgangspunkt gemacht.

1.3.1.3 Möglichkeiten der stroboskopischen Röntgentopographie

Das Verfahren der stroboskopischen Röntgentopographie ist nicht auf mechanische Schwingungabbildung beschränkt. In entsprechender Weise lassen sich stroboskopisch all die periodischen Vorgänge in Kristallen abbilden, die man mit einer Periode, die exakt ein Vielfaches der Speicherring - Umlauffrequenz von 1.04097 MHz beträgt, triggern kann. Dazu zählen neben den von uns untersuchten Volumenwellen auch akustische Oberflächenwellen,²¹ sowie auch durch mechanische Schwingungen induzierte Versetzungsschwingungen, sowie eventuell elektrochemische Prozesse, vorausgesetzt - und dies ist als allgemein gültige Bedingung für die stroboskopische Röntgentopographie anzusehen - daß sie röntgenografisch einen ausreichenden Kontrast liefern.

Denkbar wäre vielleicht auch die Abbildung von elektrischen Prozessen in Halbleiterbauelementen, soweit diese einerseits durch die intensive Strahlung nicht zerstört werden und andererseits die oben genannten Bedingungen erfüllt sind.

²¹ siehe Tanner, B. et al., Proc. SRI Conf. 82, NIMPR (1982)

2.0 THEORETISCHE GRUNDLAGEN DER RÖNTGENTOPOGRAPHIE

Es gibt zwei allgemeine Theorien, die das Verhalten von Röntgenstrahlung beim Durchgang durch Kristalle beschreiben. Die ältere, einfachere und besser bekannte ist die kinematische Theorie, die bei Kristallen mit vielen Defekten und bei solchen mit sehr geringer Dicke richtige Ergebnisse liefert.

Während diese kinematische Theorie bei Mosaikkristallen auch noch anwendbar ist, liefert hier ebenfalls und dann bei nahezu perfekten Kristall größerer Dicke ausschließlich die dynamische Theorie die richtige Beschreibung, insbesondere was die Intensität der Reflexe angeht.

Im folgenden sollen die Grundlagen beider Theorien nur insoweit vorgestellt werden, als sie für die Interpretation der experimentellen Ergebnisse von Bedeutung sind.

2.1 KINEMATISCHE THEORIE

Diese Theorie²² geht von folgenden Annahmen aus :

1. Die Photonen werden e l a s t i s c h gestreut, d.h. $|\vec{k}_0| = |\vec{k}_s|$.
2. Die von e i n e m Streuzentrum ausgehende Welle
 - a. hat eine Amplitude proportional der am Streuzentrum wirkenden Feldstärke und ist proportional der Elektronendichte;
 - b. ist abhängig von den Richtungen der einfallenden und der ausgehenden Welle;
3. Die vom g e s a m t e n Kristall ausgehende Welle ergibt sich als Überlagerung der Wellen der einzelnen Streuzentren, wobei entscheidend der Einfluß der Phase φ ist, die für jedes Streuzentrum individuell angesetzt werden muß.
4. Es tritt k e i n e m e h r f a c h e Streuung einer Welle auf.

²² beispielsweise dargestellt in Weißmantel, C.H., Hamann, C., Grundlagen der Festkörperphysik, Springer, Berlin, Heidelberg, NewYork 1979

Nach diesen Annahmen ergibt sich für die Richtung der Reflexe die Braggsche Gleichung(1) und für die Intensität gilt :

$$(2) \quad I \sim F^2$$

In die Proportionalitätskonstante gehen u.a. ein :

- Polarisationsfaktor
- Absorptionsfaktor
- Lorentzfaktor
- Temperaturfaktor.

$F(h,k,l)$, der Strukturfaktor für einen bestimmten Reflex berechnet sich aus :

$$(3) \quad F(h,k,l) = \sum_n f_n \exp(2\pi i (hu_n - kv_n - lw_n))$$

wobei für Quarz die Atompositionen u_n, v_n, w_n in der Einheitszelle im Kapitel "Struktur der Einheitszelle" auf Seite 34 angegeben sind und die Atomformfaktoren f_n als Funktion von $\sin \Theta/\lambda$ aus Tabellenwerken²³ ersichtlich sind. Im folgenden gilt : $\vec{g}=(h.k.l)$, $\vec{g}=(-h,-k,-l)$.

2.2 DYNAMISCHE THEORIE

2.2.1 Grundzüge der Theorie für den perfekten Kristall

Die in "Kinematische Theorie" auf Seite 14 aufgeführten Annahmen gehen für die dynamische Theorie in folgende Aussagen über :

1. Im Kristall gilt nicht mehr $|\vec{K}_0 = \vec{K}_g|$; es wird statt dessen angenommen, daß die Endpunkte dieser Vektoren auf der sogenannten Dispersionsfläche liegen.

²³ Ibers, J.A., Hamilton, W.C., (eds) :International Tables for X-Ray Crystallography, Vol IV., Birmingham, Kynoch Press

2. Die gestreute Intensität ist nicht mehr proportional zu F^2 sondern zu $\sqrt{FF^*}$.
3. Mehrfachstreuungen werden ausdrücklich mit einbezogen (im Formalismus der dynamischen Theorie spielt neben F_g auch F_{-g} eine Rolle).

Der prinzipielle Weg bei der Errichtung des Gerüsts der dynamischen Theorie ist der folgende :

Es handelt sich um das Problem der Wechselwirkung von elektromagnetischen Wellen mit kristalliner Materie, m.a.W., gesucht wird eine Lösung der Maxwell'schen Gleichungen in einem periodischen Medium. Letzteres wird durch eine

komplexe (wegen des Einschusses von Absorptionsvorgängen),

periodische (da Kristall),

und anisotrope (Wellen, die sich im anisotropen Festkörper ausbreiten, haben richtungsabhängige Brechungsindizes)

dielektrische Suszeptibilität χ oder die Dielektrizitätskonstante $\epsilon = 1 - \chi$ repräsentiert.

Damit ergeben sich die Größen des folgenden Abschnittes.

2.2.1.1 Komplexe physikalische Größen

Strukturfaktor. Durch

$$(4) \quad \rho(\vec{r}) = 1/V_c \cdot \sum_g F_g \cdot \exp(-2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r})$$

hängen Ladungsdichte ρ und Strukturfaktor F zusammen (V_c = Volumen der Einheitszelle), wobei der Strukturfaktor unter Ausschluß von Absorption (d.h. keine resonante Anregung der Elektronen) wie in der kinematischen Theorie gegeben ist durch

$$F_g = \sum_n f_n \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}_n)$$

(Summe über alle Atome der Einheitszelle)

Korrekturfaktoren bei Einschluß von Dispersion und Absorption führen zu:

$$(5) \quad F_{\mathbf{g}} = \sum_n (f + \Delta f' + i\Delta f'')_n \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}_n)$$

$$(6) \quad F_{\mathbf{g}} = F_{\mathbf{g}}' \text{ (abhängig von } f + \Delta f') - iF_{\mathbf{g}}'' \text{ (abhängig von } \Delta f'') \quad [24]$$

Die dielektrische Suszeptibilität setzt sich aus dem Streuteil

$$(7) \quad \chi_{r\mathbf{g}} = C_1 \cdot (r_e \lambda^2 / \pi V_c) \cdot F_{\mathbf{g}}'$$

und dem Absorptionsanteil

$$(8) \quad \chi_{i\mathbf{g}} = \Gamma F_{\mathbf{g}}'' \\ = \lambda / (2\pi V_c) \cdot \sum_n \left((C_1 \tau_{\text{Dip}} + C_2 \tau_{\text{Qua}}) \cdot \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}_n) \right)$$

mit r_e = klassischer Elektronenradius = $2.818 \cdot 10^{-15} \text{m}$
 $C_1 = 1$ (bzw. $\cos 2\theta$), $C_2 = \cos 2\theta$ (bzw. $\cos 4\theta$)
 für σ - (bzw. π -) Polarisation
 τ_{Dip} und τ_{Qua} sind Dipol- bzw. Quadrupolterme
 der atomaren Wirkungsquerschnitte

zu

$$(9) \quad \chi_{\mathbf{g}} = \chi_{r\mathbf{g}} + i \chi_{i\mathbf{g}}$$

zusammen. Größenordnungsmäßig liegt χ typisch bei 10^{-6} .

Der häufig vorkommende Faktor $(r_e \lambda^2) / (\pi V_c)$ werde im folgenden mit Γ abgekürzt.

Der Streuteil (entspr. der Absorptionsanteil) des \overline{hkl} -Reflexes ist gleich dem konjugiert komplexen des Streuteils (entspr. des Absorptionsanteils) des hkl -Reflexes.

Aus χ_0 ergibt sich in Abhängigkeit von der Wellenlänge der

Lin. Absorptionskoeffizient:

$$(10) \quad \mu_0 = 2\pi / \lambda \cdot \Gamma F_0''$$

²⁴ wobei $F_{\mathbf{g}}$, $F_{\mathbf{g}}'$ und $F_{\mathbf{g}}''$ je nach Phase wiederum komplexe Größen sein können

2.2.1.2 Das Konzept der Dispersionsfläche

Unter den Annahmen,

- daß elektrische Leitfähigkeit und magnetische Suszeptibilität verschwinden, wodurch aus den Maxwell'schen Gleichungen folgt:

$$(11) \quad \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{D} = (1 - \chi) / c^2 \cdot (\partial^2 \vec{D} / \partial t^2)$$

- daß die Laue-Gleichung gilt:

$$(12) \quad \vec{K}_{\mathbf{g}} = \vec{K}_0 + \vec{g}$$

- und daß die dielektrische Suszeptibilität wie oben angenommen periodisch im reziproken Gitter ist:

$$(13) \quad \chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} \exp(-2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r})$$

ergibt sich²⁵ als Lösungsansatz eine Linearkombination von Blochwellen:

$$(14) \quad \vec{D} = \sum_{\mathbf{g}} \vec{D}_{\mathbf{g}} \exp(-2\pi i \vec{K}_{\mathbf{g}} \cdot \vec{r}) \exp(i\omega t)$$

Zweistrahlnäherung: Zur Vereinfachung nimmt man nun an, daß nur ein reziproker Gittervektor \vec{g} nahe genug der Ewald-Kugel ist, um eine nennenswerte reflektierte Amplitude zu liefern. Diese Annahme von nur zwei sich im Kristall ausbreitenden Wellenvektoren führt auf die Grundgleichung der dynamischen Theorie, die zugleich die Gleichung der Dispersionsfläche als dem Ort der möglichen Endpunkte von anregbaren $\vec{K}_{\mathbf{g}} / \vec{K}_0$ Wellenvektor-Paaren ist:

$$(15) \quad \alpha_0 \alpha_{\mathbf{g}} = 1/4 k^2 C^2 \chi_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}}$$

$$\text{mit} \quad \alpha_0 = 1/2k \cdot \left(\vec{K}_0 \cdot \vec{K}_0 - k^2(1 + \chi_0) \right) \quad \alpha_{\mathbf{g}} = 1/2k \cdot \left(\vec{K}_{\mathbf{g}} \cdot \vec{K}_{\mathbf{g}} - k^2(1 + \chi_0) \right)$$

k = Wellenvektor im Vakuum

$$C = \begin{cases} 1 & : \sigma\text{-Polarisation} \\ \cos 2\theta & : \pi\text{-Polarisation} \end{cases}$$

²⁵ Herleitung z.B. in Batterman, B.W., Cole, H., Reviews of modern physics, vol 36 no.3 p. 681 - 717 July 1964 Appendix A

2.2.1.3 Physikalische Bedeutung der Dispersionsfläche

Im folgenden soll an einigen Beispielen gezeigt werden, wie man aus den Größen der Dispersionsfläche physikalische Aussagen ableiten kann.

Ebene Welle. Wie aus der Konstruktion der Dispersionsfläche Aussagen sowohl über Richtung als auch Intensität der Röntgenstrahlen gewonnen werden können, soll im folgenden für den symmetrischen Laue-Fall ($\vec{n} \cdot \vec{s}_0 = \vec{n} \cdot \vec{s}_g$) dargestellt werden. Für jeden tie-point gilt unter Vernachlässigung der Absorption näherungsweise:

$$(16) \quad |\vec{D}_g| / |\vec{D}_0| = \sqrt{(\alpha_0 / \alpha_g)}$$

Dies wird in Abbildung 11 dargestellt. Bei exakt erfüllter Bragg - Bedingung gilt für die Amplituden $|\vec{D}_0| = |\vec{D}_g|$; entfernt man sich von der Bragg - Bedingung ("wandert" man also auf der Dispersionsfläche "nach oben oder unten"), so wird jeweils der \vec{D}_0 -Strahl stärker angeregt als der \vec{D}_g -Strahl, d.h. nur eine der beiden Schalen der Dispersionsfläche gewinnt physikalische Bedeutung.

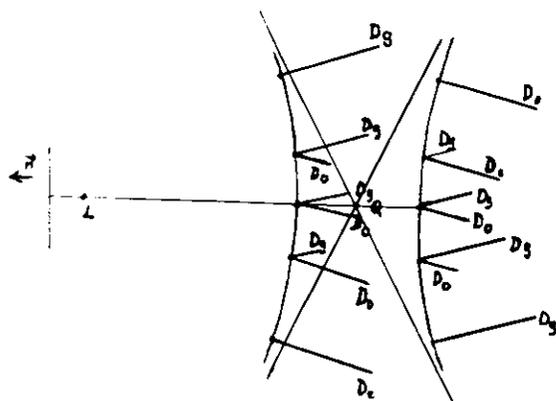


Abbildung 11. Feldamplituden auf der Dispersionsfläche: Es ist schematisch dargestellt, wie sich das Verhältnis der Feldamplituden in Abhängigkeit vom angeregten tie point ändert (hier für den symmetrischen Laue-Fall).

Die Energieflußrichtung steht jeweils senkrecht auf der Dispersionsfläche. Für die exakt erfüllte Bragg-Bedingung verlaufen also beide Strahlen und

damit auch der Energiefluß parallel zu den Netzebenen. Bei Entfernung von dieser Bedingung separieren die Energieflüsse der beiden Dispersionsflächen - Schalen s_1 und s_2 innerhalb des 2θ -Winkels in der in Abbildung 12 dargestellten Weise.

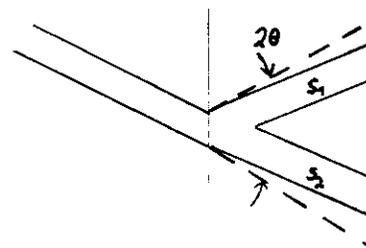


Abbildung 12. Separation der Energieflüsse bei Abweichung vom Bragg-Winkel: Die Abweichung kann innerhalb des gesamten 2θ -Winkels erfolgen

Werden Wellenfelder von beiden Schalen der Dispersionsfläche annähernd gleich stark angeregt, so können sie bei Überlagerung im Kristall interferieren. Bei spezieller Geometrie der Probe, beispielsweise bei Keilform, führt dies im Projektionstopogramm zu Interferenzstreifen, die eine Periode von der in "Ausbreitung von Wellenfeldern im schwach deformierten Kristallgitter" auf Seite 25 definierten Extinktionslänge haben. Je perfekter der Kristall ist, desto deutlicher werden diese sogenannten Pendellösungsstreifen, die entlang der "Höhenlinie" gleicher Kristalldicke verlaufen, sichtbar.²⁷

In diesem Zusammenhang möchte ich auf die Topogramme von Abbildung 31 auf Seite 52 und Abbildung 74 auf Seite 103 verweisen, die deutlich zeigen, wie empfindlich diese Interferenzmuster auf Gitterverzerrungen reagieren.

Kugelwelle. Der Formalismus der dynamischen Theorie muß bei Annahme von Kugel- anstelle ebener Wellen erheblich erweitert werden. Trifft eine Kugelwelle auf eine Netzebenenschar, so werden die tie-points so angeregt, daß eine Ausbreitung von Wellen im gesamten 2θ -Winkel, d.h. also im Borrmann-Fächer erfolgt. Aus Abbildung 11 auf Seite 21 ist auch anschaulich eine weitere Eigenschaft ersichtlich, die für das Sektionstopogramm

²⁷ Näheres zum Thema Pendellösungsstreifen findet sich in Tanner, B.K.X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976.

von Bedeutung ist : Werden alle tie-points gleichmäßig angeregt, so emittieren die Randpunkte infolge der geringeren Krümmung der Dispersionsfläche alle fast in dieselbe Richtung, so daß es zu einer starken Überhöhung der Intensität an den Randern des Sektionstopogrammes kommt, wie Abbildung 13 im Teil a) zeigt. Wird der Kristall allerdings dicker ($\mu t > 2$), so überwiegt die im Randbereich stärkere Absorption diesen Effekt, so daß sich eine Intensitätskurve wie in Teil b) bis d) dieser Abbildung ergibt. In Abbildung 13 wurde vernachlässigt, daß die eingezeichnete Intensitätsverteilung erst als Integral einer oszillierenden Intensitätsverteilung auftritt. Diese Oszillationen, es handelt sich um Pendellösungstreifen parallel zur Kante des Sektionstopogrammes, kommen wie im vorigen Abschnitt durch Interferenzeffekte zustande : jeweils die Wellenfelder von den beiden tie points auf den Dispersionsflächeschalen, deren Ausbreitungsrichtung identisch ist, interferieren miteinander. Daß diese Pendellösungstreifen in den Topogrammen dieser Arbeit nicht zu sehen sind, liegt hauptsächlich daran, daß sie bei einer Spaltbreite von über 100 μm nicht aufgelöst werden können.

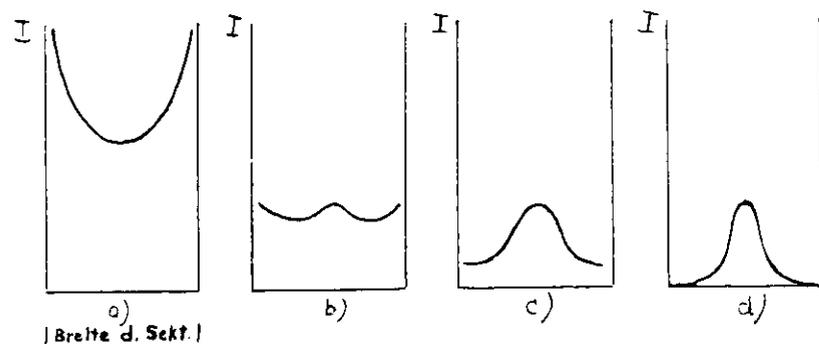


Abbildung 13 Sektionstopogramm-Intensitätsverteilung: Dargestellt für verschiedene Absorptiongrade: a) $\mu t=0$, b) $\mu t=2$, c) $\mu t=6$ d) $\mu t=10$.

2.2.2 Grundzüge der Theorie bei Gitterverzerrungen

Ein Kontrast in einem Topogramm entsteht, wenn bestimmte Stellen des Kristalles durch eine Gitterverzerrung eine gegenüber dem perfekten Kri-

stall geänderte Intensität reflektieren. Notwendige Grundbedingung für die Sichtbarkeit des Kontrastes ist, daß die Verzerrung eine Komponente senkrecht zu den reflektierenden Netzebenen hat, d.h.

$$(17) \quad \vec{u} \cdot \vec{g} \neq 0$$

\vec{u} = Verschiebungsvektor

\vec{g} = reziproker Gittervektor der reflektierenden Netzebenen-schar

Anhängig von der Kristallstruktur wird der Kontrast also allgemein nur in bestimmten Reflexen sichtbar sein. Im Fall des Quarzes verschwindet jedoch wegen der speziellen anisotropen Kristallstruktur der Kontrast jedoch nie völlig; insofern kann eine Bestimmung des Burgers-Vektors²⁸ nicht durch Vergleich der Reflexe erfolgen; dieses ist nur durch Vergleich mit Sektionstopogramm - Simulations - Bildern, deren Kontrast Burgers-Vektor-abhängig ist, durchführbar.²⁹

Die Struktur eines Kontrastes kann sehr unterschiedlich sein. Sie ist bedingt

1. durch das angewendete Aufnahmeverfahren, also beispielsweise durch
 - die benutzte Wellenlänge,
 - die Divergenz der Strahlung,
 - die Justierung,
 - die Reflexordnung;
2. durch die physikalische Ursache des Entstehens. Beispiele sind :
 - Orientierungskontrast,³⁰
 - Versetzungskontrast in drei verschiedenen Formen :
 - direktes Bild
 - dynamisches Bild
 - intermediäres Bild

²⁸ Zur Definition des Burgers-Vektors siehe "Der Burgers-Vektor" auf Seite 64.

²⁹ siehe Epelboin, Y., Patel, J.R., J. Appl. Phys., vol. 53 no 1, p.271-75 (1982)

³⁰ hier nicht behandelt; zur Erklärung siehe beispielsweise Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976

Im folgenden sollen einige Charakteristika des Strahlenverlaufes für zwei spezielle Kontrastentstehungsursachen dargestellt werden : für eine Verbiegung eines Kristalles und für eine Versetzung im Kristall. Dabei können Aussagen über den Ort und die Art des Kontrastes im Topogramm gemacht werden. Die Anwendung der benutzten Theorien für eine quantitative Bestimmung der Kontrastintensität steht insbesondere wegen der bei Nutzung von Synchrotronstrahlung entstehenden Komplikationen (z.B. mehrere Harmonische in einem Topogramm) noch aus.

2.2.2.1 Ausbreitung von Wellenfeldern im schwach deformierten Kristallgitter

Gitterverbiegungen, insbesondere auch piezoelektrisch angeregte Schwingungen, führen im Röntgen-Reflex zu einer erhöhten integralen reflektierten Intensität. Dies wurde erstmalig schon 1931 von Fox et al.³¹ experimentell festgestellt.

Die physikalische Ursache hierfür liegt in der endlichen Reflektionsbreite eines perfekten Kristalles, der also nur Intensitäten in einem bestimmten Energiebereich reflektieren kann. Bei einer Verkrümmung können bei einfallendem weißen Strahl auch noch benachbarte Frequenzen ihre Reflektionsbedingung finden. Je stärker der Gradient der Verkrümmung ist, desto größer wird die Intensitätserhöhung. Langsam variierende Gitterverkrümmungen rufen keinen Kontrast hervor, solange ein kritischer Wert nicht überschritten wird. Eine auf der Theorie von Bonse³² basierende Abschätzung von Graeff³³ für diesen Grenzwert besagt folgendes : Die relevanten Komponenten des Verzerrungsgradienten sind nach Bonse³² :

$$(18) \quad \cos^2\theta \cdot FF - \sin^2\theta \cdot NN$$

wobei FF die Krümmung der Netzebenen und NN den Gradient des Gitterabstandes beschreibt. Im Fall der thickness-shear - Schwingungsmode³⁴ haben wir eine reine Verkrümmung der Netzebenen :

$$(19) \quad FF = \partial^2(\vec{u} \cdot \hat{g}) / \partial y^2 \quad NN = 0$$

wobei \hat{g} ein Einheitsvektor in der Richtung des Beugungsvektors ist.

Ein grobes Kriterium besagt nun, daß ein Kontrast sichtbar wird, wenn die Änderung der Gitter-Verzerrung innerhalb einer Extinktionslänge Δ_e groß im Vergleich zur dynamischen Reflektionsbreite $\Delta\psi$ ist :

$$(20) \quad \Delta_e \cdot \cos^2\theta \cdot \partial^2(\vec{u} \cdot \hat{g}) / \partial y^2 \gg \Delta\psi$$

Die Extinktionslänge berechnet sich aus :

$$(21) \quad \Delta_e = \lambda \cdot \sqrt{(\gamma_0 \gamma_e)} / \left(C_i \cdot \sqrt{|\chi_e \chi_i|} \right)$$

und die dynamische Reflektionsbreite aus :

$$(22) \quad \Delta\psi = 2 \cdot C_i \cdot \sqrt{|\chi_e \chi_i|} \cdot \sqrt{(\gamma_e / \gamma_0)} / \sin 2\theta$$

Nach den in "Zusammenstellung wichtiger physikalischer Größen" auf Seite 94 und "Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz" auf Seite 57 berechneten Größen ergibt sich für den 12-2-Reflex :

$$\Delta_e = 100 \mu m$$

$$\Delta\psi = 3.5 \cdot 10^{-6}$$

$$\theta = 8^\circ$$

$$\vec{u} \cdot \hat{g} = 0.36 u_1$$

Danach sollte ein Kontrast sichtbar werden, wenn die Verzerrung S_e einen Wert erreicht, der gemäß den Berechnungen von Kapitel "Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz" auf Seite 57 durch Anlegen einer elektrischen Spannung von etwa 0.2V erreicht wird, was in grobem Einklang mit den Beobachtungen steht.

³¹ Fox, G.W., Carr, P.H., Physical Review, vol 37 p 1622 (1931)

³² Bonse, U., Zeitschrift für Physik 177, 385-423 (1964)

³³ W. Graeff, persönliche Mitteilung

³⁴ erklärt in Abschnitt "Schwingungsformen" auf Seite 53

Eikonal versus Takagi-Taupin Theorie. Über eine derartig vereinfachte Abschätzung hinaus gibt es zwei Theorien zur Beschreibung des Wellenfeldes im deformierten Kristall, die je nach Grad der Verkrümmung der Netzebenen anwendbar sind. Das schwach deformierte Gitter beschreibt die Eikonal-, das stark deformierte Gitter die Takagi-Taupin - Theorie.

Als Grenzkriterium gibt Tanner³⁵ an : Wenn der kritische Radius R_c

$$(23) \quad R_c = \bar{g} \cdot \Delta_e^2$$

überschritten wird, d.h. der Verzerrungsgradient kleiner wird, ist eine analoge Übertragung der Eikonaltheorie der geometrischen Optik auf die Röntgenstrahlausbreitung möglich. Der Strahlverlauf paßt sich durch einen gekrümmten Weg der Verkrümmung der Netzebenen an.^{36 37}

Eine Abschätzung der bei unseren Experimenten vorliegenden Situation ergibt einen Kritischen Radius von $R_c \approx 140m$. Nach "Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz" auf Seite 57 ergibt sich pro Volt angelegter Spannung eine Schwingungsamplitude von $0.1 \mu m$; eine Abschätzung des dabei auftretenden Krümmungsradius ergibt bereits bei $0.1V$ $R=50m$, so daß die Eikonaltheorie nicht anwendbar ist.

Für größere Verzerrungsgradienten wurden von Takagi³⁸ und unabhängig davon auch von Taupin³⁹ Theorien entwickelt, die davon ausgehen, daß am Ort hoher Verzerrung neue Wellenfelder entstehen. Es tritt das sogenannte "interbranch-scattering" auf, welches durch Abbildung 14 auf Seite 28 erläutert werden soll.

Tritt nun die Verkrümmung wie in unserem Fall über größere Bereiche des Kristalles auf, so geht die Vorstellung eines Strahlweges völlig verloren.

³⁵ Tanner, B.K.X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S.75

³⁶ Eine derartige Theorie der Strahlweges im schwach deformierten Gitter liefert beispielsweise Bonse in Bonse, U., Zeitschrift für Physik 177, 385-423 (1964)

³⁷ Zur genaueren Darstellung der Eikonal-Theorie siehe z.B. Authier, A.: Section Topography, in X-Ray Optics, Queisser, H.J., (ed.) Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1977 S.166 ff. oder Tanner, B.K.X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S.71 ff.

³⁸ Takagi, S., Acta Cryst. 15, 1311 (1962) und Takagi, S., J. Phys. Soc. Japan 26, 1239 (1969)

³⁹ Taupin, D., Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist. 87, 469 (1964)

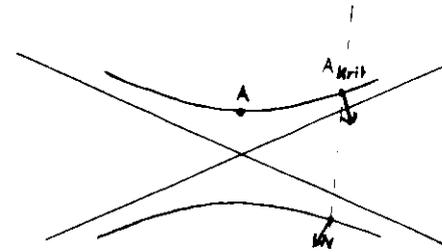


Abbildung 14. Interbranch-scattering: Wenn die Bloch - Welle auf stark deformierte Gitterstellen trifft, wandert der tie-point A bis der kritische Radius R_c erreicht wird und dann wird ein neuer tie-point N auf der gegenüberliegenden Schale der Dispersionsfläche angeregt (siehe auch die Strahlwege in Abbildung 15 auf Seite 29 und die Bemerkungen dazu im Abschnitt "Dynamisches Bild." auf Seite 31).

Die partiellen Takagi - Differentialgleichungen⁴⁰ müssen dann numerisch auf dem Computer gelöst werden.

Das grundsätzliche Verhalten der Intensitätserhöhung wird nach Isherwood und Wallace⁴¹ unter Ausgang von Kato's Theorie⁴², die hier näherungsweise die gleichen Aussagen macht wie die Takagische Theorie, beschrieben durch

$$I = I (q)$$

mit dem Parameter

$$(24) \quad q = \frac{\partial}{\partial K_0} \frac{\partial}{\partial K_g} \left(\bar{g} \cdot \bar{u} \right)$$

⁴⁰ siehe z.B. Tanner, B.K.X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S. 79

⁴¹ Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1827-42 (1975)

⁴² Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 18, no 12p. 1785 ff. (1963); Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 19, no.1p. 67 ff. (1964); Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 19, no.6p. 971 ff. (1964)

In Worten :

- Die Intensität ist nicht empfindlich gegenüber Verschiebung in der reflektierenden Netzebene.
- Die Intensität ist abhängig von der zweiten räumlichen Ableitung der Verschiebungskomponente senkrecht zur Bragg - Ebene.
- Die Intensität ist nicht empfindlich gegenüber Verzerrungsgradienten normal zur Einfallsebene, die von \vec{K}_0 und \vec{K}_1 aufgespannt wird.
- Bei sinusförmiger Auslenkung ist das Intensitätsprofil von der Form Betrag-Sinus.

2.2.2.2 Versetzungskontraste

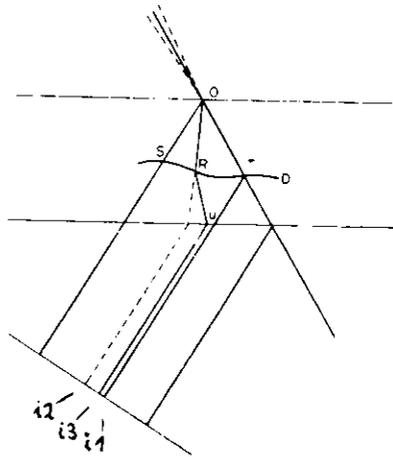


Abbildung 15. Bildung von Versetzungskontrasten: i1) direktes Bild i2) dynamisches Bild i3) intermediäres Bild.

Bereits bei Annäherung bis auf $10 \mu\text{m}$ an eine Versetzung ist die Gitterverzerrung so hoch, daß die Gültigkeitsbedingung der Eikonol-Theorie nicht mehr erfüllt ist. Zur - auch quantitativen - Berechnung von Versetzungskontrasten hat sich deshalb die Takagi - Taupin - Theorie sehr bewährt. Für ein Sektionstopogramm soll im folgenden der entstehende Versetzungskontrast dargestellt werden.

Bereits in Abbildung 5 auf Seite 5 wurde die Konstruktion des sogenannten direkten oder kinematischen Bildes (i1) dargestellt. Je nach Position der Versetzung im Borrmann-Fächer, ihrer Orientierung, der Kristalldicke, der Absorption und der Belichtungsdauer tauchen zwei weitere Arten von Kontrasten auf, die als dynamisches (i2) bzw. intermediäres (i3) Bild bezeichnet werden.

Direktes Bild.

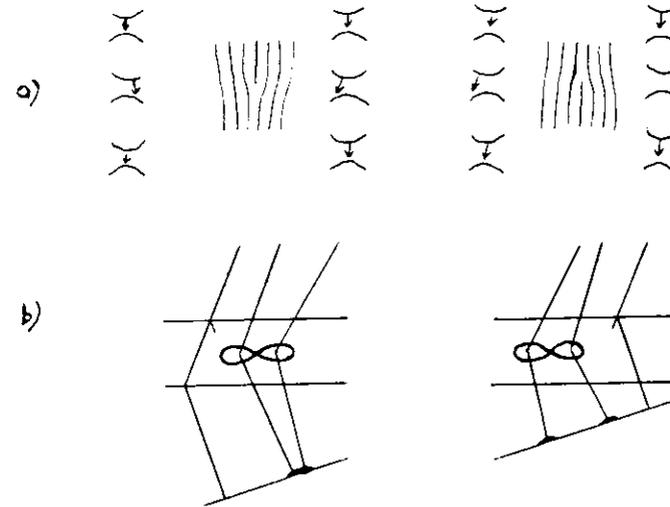


Abbildung 16. Doppelkontrast des direkten Bildes einer Versetzung: a) Skizzierung des Wanderns der tie-points in der Umgebung einer Versetzung b) Resultierender Strahlweg; angedeutet sind die Kurven gleicher Fehlorientierung um den Versetzungskern

Art : Kinematische Bilder zeichnen sich zumindest in ausgewählten Reflexen durch eine Doppelstruktur aus, deren Zustandekommen⁴³ Abbildung 16 erklärt. Ein guter Test auf eine eventuell vorhandene Doppelstruktur ist die Aufnahme einer Sektionstopogramm - Sequenz mit

⁴³ siehe auch Tanner, B.K., Midgley, D., Safa, M., J. Appl. Cryst. 10, 281 - 86 (1977)

variierendem Abstand Probe/Film, aus dem sich eine Änderung des Kontrastes ergeben müßte.

Ort : Die Berechnung des Ortes des direkten Bildes wird im Detail im Kapitel "Herleitung der Berechnung der Ruhelage" auf Seite 114 hergeleitet.

Dynamisches Bild.

Art : Durch das am Punkt P stattfindende interbranch-scattering wird ein Teil der Intensität des Richtung Punkt M laufenden Strahles zum intermediären Bild i_3 abgelenkt. Deshalb ist der dynamische Kontrast ein Kontrast verminderter Intensität. Nach Authier⁴⁴ gilt außerdem, daß der dynamische Kontrast im hkl-Reflex identisch dem im $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ -Reflex ist.

Ort : Die Breite eines dynamischen Bildes ist umso größer, je weiter die Versetzung von der Rückseite des Kristalles entfernt ist. Bei konstanter Tiefe ist sie im Zentrum des Borrmann-Fächers, d.h. in der Mitte des Sektionstopogrammes maximal.

Intermediäres Bild.

Art : Das am Punkt P durch interbranch-scattering hervorgerufene neue Wellenfeld verläuft kohärent zur Eingangswelle in einem erneuten Borrmann-Fächer. Infolge der Interferenz mit einfallenden Wellenzügen vom Typ AQ kommt es zu räumlich oszillierenden Interferenzmustern am Ort zwischen dem dynamischen und dem direkten Bild.

⁴⁴ Authier, A.: Section Topography, in X-Ray Optics. Queisser, H.J., (ed.) Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1977 S.173

QUARZ

3.0 ALLGEMEINE GRUNDLAGEN

Im folgenden sollen die wichtigsten Daten und Strukturen des Quarzes dargestellt werden, soweit sie als Grundlage für die Ableitungen im Kapitel "Der α -Quarz" auf Seite 43 benötigt werden.

3.1 DIE KRISTALLOGRAPHISCHE STRUKTUR VON α -QUARZ

3.1.1 Die Bindung

Quarz liegt je nach Druck und Temperatur in einer unterschiedlichen kristallographischen Struktur vor, deren Auftreten in Abbildung 17 als (p,T)-Diagramm dargestellt sind. Wir haben mit α -Quarz gearbeitet.

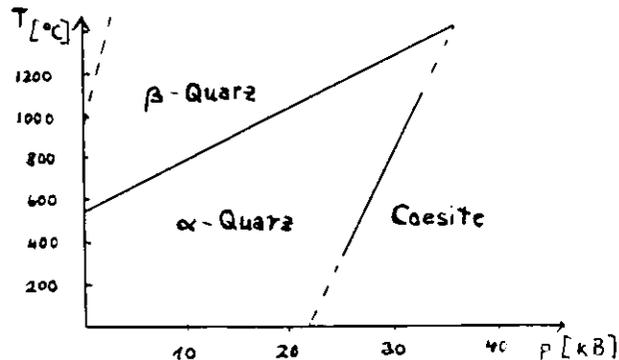


Abbildung 17. Phasendiagramm der kristallografischen Quarz-Strukturen : dargestellt in Abhängigkeit von Druck und Temperatur

α -Quarz ist eine SiO_2 Verbindung, bei der - wie in Abbildung 18 auf Seite 34 dargestellt - jeweils vier Sauerstoff-Atome an den Ecken eines Tetraeders sitzen, dessen Zentrum ein Silizium-Atom einnimmt. Diese Tetraeder sind derart aneinandergereiht, daß jedes Sauerstoff-Atom zu

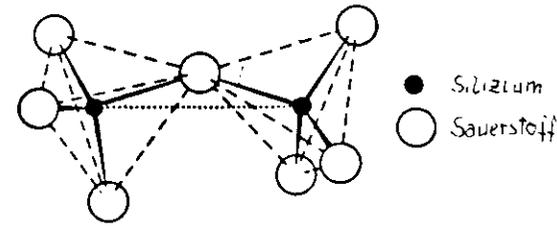


Abbildung 18. Quarz-Bindung in Form von SiO_2 -Tetraedern

zwei Silizium-Atomen gehört. Ausgehend von einer starken kovalenten Si-O Bindung gibt es in der Literatur verschiedene Ansätze zur Beschreibung der Bindung im komplexen Gesamtgitterzusammenhang.

- Auf der einen Seite stehen die Arbeiten von z.B. Barron et al.(1976)⁴⁶, in denen neben der kovalenten Si-O Bindung sowohl eine Si-Si, als auch eine O-O Bindung zur Erklärung der optischen Dispersionskurven und der elastischen Konstanten angenommen wird.
- Demgegenüber haben Arbeiten, die sich mit Versetzungsbewegungen in Quarz befassen,⁴⁷ sich zunächst einmal auf ein vereinfachtes Modell beschränkt : Man geht von einer kovalenten Si-Si Bindung über eine O-Brücke und einer daraus abgeleiteten sp^3 -Hybridisierung aus und bildet damit Modelle von Versetzungen, bei denen die Sauerstoff-Atome nicht auftauchen. Ein derart vereinfachendes Modell genügt zwar zur Darstellung elementarer Versetzungsorientierungen, versagt aber naturgemäß bei Effekten, die vom Kern der Versetzung herrühren.

3.1.2 Struktur der Einheitszelle

Jeweils drei Tetraeder, also neun Atome gehören zu einer Einheitszelle. Dies führt zu einer recht komplizierten dreidimensionalen Struktur, die mit den folgenden Zeichnungen erläutert werden soll.

⁴⁵ Quelle der Abbildung : Barron, T.H.K. et al., J. Phys. C: Solid State Phys., Vol.9, S. 3925-3940 (1976)

⁴⁶ Barron, T.H.K. et al., J. Phys. C: Solid State Phys., Vol.9, S. 3925-3940 (1976)

⁴⁷ beispielsweise Trepied, L., Doukhan, J.-C., phys.stat.sol.(a) 49, S.713-24 (1978)

Die Elementarzelle wird in hexagonaler Vier-Komponenten-Schreibweise durch die primitiven Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 und \vec{c} , das reziproke Gitter hingegen durch die Vektoren \vec{A} , \vec{B} und \vec{C} aufgespannt.

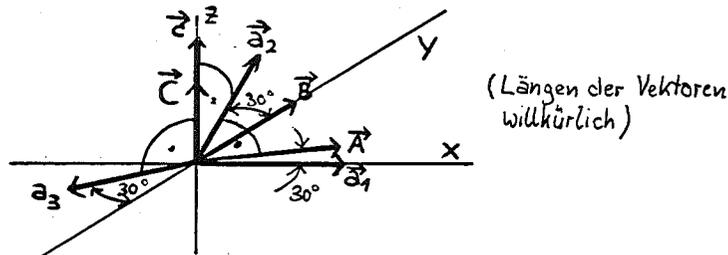


Abbildung 19. Darstellung der primitiven Basisvektoren

Gemäß Abbildung 19 gilt in Bezug auf das xyz - Koordinatensystem :

Koord. im xyz-System

- (1) $\vec{a}_1 = |\vec{a}| (1, 0, 0)$
- (2) $\vec{a}_2 = |\vec{a}| (-1/2, \sqrt{3}/2, 0)$
- (3) $\vec{a}_3 = |\vec{a}| (-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$
- (4) $\vec{c} = |\vec{c}| (0, 0, 1)$

und für die reziproken Vektoren :

- (5) $\vec{A} = |\vec{a}|^{-1} (1, 1/\sqrt{3}, 0)$
- (6) $\vec{B} = |\vec{a}|^{-1} (0, 2/\sqrt{3}, 0)$
- (7) $\vec{C} = |\vec{c}|^{-1} (0, 0, 1)$

mit⁴⁸

$$|\vec{a}| = (4.9134 \pm 0.0005) \cdot 10^{-10} \text{m}$$

$$|\vec{c}| = (5.4052 \pm 0.0005) \cdot 10^{-10} \text{m}$$

$$\text{Volumen der Einheitszelle} : 113.01 \cdot 10^{-30} \text{m}^3$$

⁴⁸ Daten nach Cohen, A.J., Sumner, G.G., Amer. Min. 43, S.58-68 (1958)

In Bezug auf diese primitiven Basisvektoren sind die neun Atome der Einheitszelle wie folgt angeordnet :^{49 50}

(8)	SILIZIUM	1	$\langle p \ 0 \ 0 \rangle$
		2	$\langle \bar{p} \ \bar{p} \ \frac{1}{2} \rangle$
		3	$\langle 0 \ p \ \frac{3}{2} \rangle$
	SAUERSTOFF	4	$\langle q \ r \ s \rangle$
		5	$\langle r - q \ \bar{q} \ s + \frac{1}{2} \rangle$
		6	$\langle \bar{r} \ q - r \ s + \frac{3}{2} \rangle$
		7	$\langle q - r \ \bar{r} \ \bar{s} \rangle$
		8	$\langle r \ q \ \frac{3}{2} - s \rangle$
		9	$\langle \bar{q} \ r - q \ \frac{1}{2} - s \rangle$

$$\text{mit } p = 0.465 \quad q = 0.415 \quad r = 0.272 \quad s = 0.120$$

Diese Anordnung wird in der Projektion in die 0001-Ebene in der folgenden Abbildung 20 dargestellt :⁴⁹

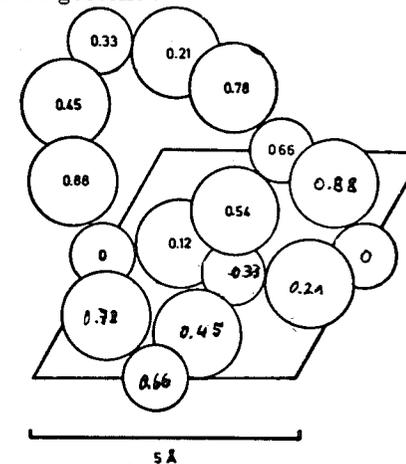


Abbildung 20. Projektion der Einheitszelle in die 0001-Ebene

⁴⁹ Quelle der Daten : Preuss, E. et al, Laue - Atlas, Bertelsmann Universitätsverlag 1975

⁵⁰ Angaben über Atomabstände und Winkel zwischen verschiedenen Bindungen finden sich in Le Page, Y., Donnay, G., Acta Cryst. B32, S. 2456 (1976)

3.1.3 Kristallgittersymmetrien

Die Gesamtstruktur des Gitters, also die Aneinanderreihung der Tetraeder, zeigt Abbildung 21⁵¹ ebenfalls in einer Projektion in die 0001-Ebene (basale Ebene).

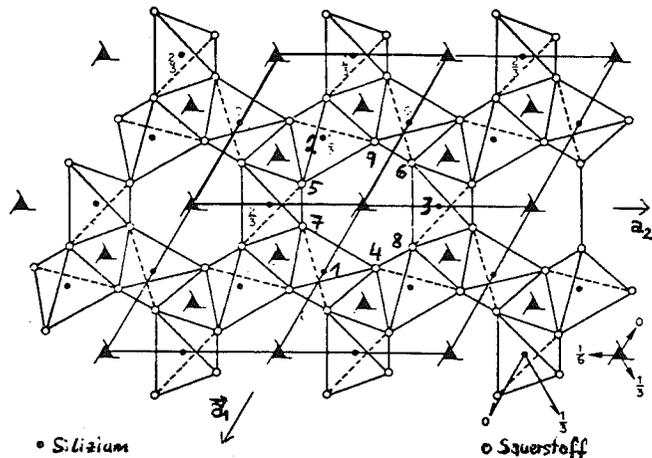


Abbildung 21. Projektion des Quarz-Kristallgitters in die 0001-Ebene

Prinzipiell gibt es zwei verschiedene räumliche Anordnungsmöglichkeiten: je nach dem Drehsinn der helixartig ineinander verflochtenen Tetraeder-Ketten unterscheidet man Links- und Rechts-Quarz.⁵² Der von uns untersuchte Quarz war ein Rechts-Quarz, folglich zeigen die Abbildungen dieser Arbeit ebenfalls Rechts-Quarze.

Rechts-Quarz⁵³ hat eine trigonale Kristallsymmetrie der Kristallklasse 3 2 und die Raumgruppe P3₂21(D₃⁶).

⁵¹ Quelle der Abbildung Nicolas, A., Poirier, J.P., Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, John Wiley 1976, S. 203

⁵² unterscheidbar z.B. aufgrund ihrer optischen Aktivität (Drehung der Polarisationsrichtung des Lichtes)

⁵³ Raumgruppe von Links-Quarz: P3₁21(D₃⁴)

3.1.4 Netzebenenabstände

Ohne Herleitung soll noch die Gleichung zur Berechnung von Netzebenenabständen angegeben werden:

$$(9) \quad \frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{|\vec{a}|^2} + \frac{l^2}{|\vec{c}|^2} \quad \text{für } \vec{g} = (hk \cdot l)$$

3.2 KRISTALLGITTERDYNAMIK

3.2.1 Elastische Konstanten

Um das Verhalten eines Quarzes bei akustischen Schwingungen zu beschreiben, ist eine genaue Kenntnis seiner elastischen Konstanten nötig. Dazu gibt es Theorien verschiedenen Komplexitätsgrades, mit denen einfachster ich beginnen will:

3.2.1.1 Isotrope elastische Kontinuumstheorie

Für kleine Winkel einer Verzerrung eines elastischen Körpers in einer Dimension gilt das Hookesche Gesetz.⁵⁴

$$(10) \quad \underline{T} = C \cdot S$$

mit

T = mechanische Spannung

C = Elastizitätsmodul

S = mechanische Verzerrung

wobei die letztere definiert ist als:

$$(11) \quad S = \Delta u / u \quad \text{mit } u = \text{räumliche Verschiebung}$$

⁵⁴ siehe auch "Die klassische Elastizitätslehre" auf Seite 61

3.2.1.2 Anisotrope elastische Kontinuumstheorie

Verallgemeinerte Konstanten. Die nächste Verfeinerung des Modelles besteht darin, daß man die Anisotropie eines Kristallgitters mit einbezieht und zur Beschreibung eine tensorielle Schreibweise gebraucht : Die Definition der Verzerrung S_{ik} geht über in

$$(12) \quad \Delta \vec{u}(\vec{r}) = (S_{ik}) \Delta \vec{r}$$

wobei (S_{ik}) eine 3x3-Matrix mit sechs unabhängigen Komponenten ist.⁵⁵ Diese Gleichung läßt sich nach S auflösen. In der Notation von Voigt⁵⁶ gilt :

$$(13) \quad S_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x} \right)^2 \right]$$

$$(14) \quad S_2 = \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_2}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial y} \right)^2 \right]$$

$$(15) \quad S_3 = \frac{\partial u_3}{\partial z} + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_2}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial z} \right)^2 \right]$$

$$(16) \quad S_4 = \frac{\partial u_3}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial z} + \left[\frac{\partial u_1}{\partial y} \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_2}{\partial y} \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial y} \frac{\partial u_3}{\partial z} \right]$$

$$(17) \quad S_5 = \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} + \left[\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_2}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} \frac{\partial u_3}{\partial z} \right]$$

$$(18) \quad S_6 = \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x} + \left[\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3}{\partial x} \frac{\partial u_3}{\partial y} \right]$$

wobei die Notation ist :

$$(19) \quad S_{11}=S_1 \quad S_{22}=S_2 \quad S_{33}=S_3 \quad 2S_{23}=S_4 \quad 2S_{13}=S_5 \quad 2S_{12}=S_6$$

⁵⁵ (S_{ik}) ist die von mir gewählte Schreibweise für eine quadratische Matrix

⁵⁶ Voigt, W., Lehrbuch der Kristall Physik, (1928)

Das Hookesche Gesetz wird folgendermaßen verallgemeinert :

$$(20) \quad T_i = \sum_k C_{ik} S_k \quad i,k = 1,2,\dots,6$$

wobei die durch die an den Oberflächen angreifenden Kräfte hervorgerufenen mechanischen Spannungen T_i in analoger Weise zu S_i definiert sind.

C_{ik} ist der Elastizitätsmodul mit 36 unabhängigen Komponenten.

Die Umkehrung ergibt :

$$(21) \quad S_x = \sum_i E_{ik} T_i$$

wobei E_{ik} die verallgemeinerten Elastizitätskonstanten sind

Bewegungsgleichungen. Die aus diesen verallgemeinerten Konstanten abgeleiteten Bewegungsgleichungen (für Gitterschwingungen)⁵⁷ lauten :

$$(22) \quad \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \frac{\partial T_1}{\partial x} + \frac{\partial T_6}{\partial y} + \frac{\partial T_5}{\partial z}$$

$$(23) \quad \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = \frac{\partial T_6}{\partial x} + \frac{\partial T_2}{\partial y} + \frac{\partial T_4}{\partial z}$$

$$(24) \quad \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = \frac{\partial T_5}{\partial x} + \frac{\partial T_4}{\partial y} + \frac{\partial T_3}{\partial z}$$

mit ρ = spezifische Masse des Kristalles

⁵⁷ Herleitung beispielsweise in Gagnepain, J.J., Besson, R., in Band 11 von Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, S. 245 ff.

3.2.1.3 Nichtlinearitäten und Dämpfungsterme

Das verallgemeinerte Hookesche Gesetz gilt nur für kleine Auslenkungen, bei denen man von linearer Elastizität ausgeht. Genauere Ergebnisse bei größeren Amplituden liefert die nichtlineare elastische Kontinuumstheorie, auf die hier jedoch nicht weiter eingegangen werden soll.⁵⁸ Hingegen soll durchaus mit einbezogen werden, daß Dämpfungsterme auftreten,⁵⁹ die die Gleichung (20) erweitern zu :

$$(25) \quad T_i = \sum_k C_{ik} S_k - \sum_j r_{ij} (\partial S_j / \partial t) \quad \text{mit } i, j, k = 1, 2, \dots, 6$$

wobei r_{ij} = elastischer Dämpfungsmodul (6x6-Matrix)⁶⁰

3.2.2 Piezoelektrische Konstanten

Neben mechanischen Spannungen unterliegt der Quarz in unseren Experimenten auch dem Einfluß äußerer elektrischer Felder. Quarz ist piezoelektrisch, d.h. beim Anlegen äußerer elektrischer Felder erfährt das Gitter eine Verzerrung und damit eine Polarisation. Die Dynamik von Gitterschwingungen ergibt sich aus dem Zusammenspiel der mechanischen und piezoelektrischen Kräfte. Gleichung (25) wird also in folgender Weise zu erweitern sein :

$$(26) \quad T_i = \sum_k C_{ik} S_k - \sum_j r_{ij} (\partial S_j / \partial t) - \sum_m e_{mi} E_m \quad \text{mit } i, j, k = 1, 6 \quad m = 1, 3$$

wobei e_{mi} = piezoelektrischer Modul (3x6-Matrix)⁶¹

Die zweite entscheidende Grundgleichung⁶² beschreibt die Abhängigkeit der elektrischen Verschiebung D von mechanischen Spannungen und elektrischen Feldern :

$$(27) \quad D_i = \sum_j \epsilon_{ij} S_j + \sum_m \epsilon_{hm} E_m \quad \text{mit } j = 1, 6, \quad h, m = 1, 3$$

wobei ϵ_{hm} die dielektrischen Konstanten sind.

Für Quarz ergeben sich folgende Werte⁶³

Matrix der piezoelektrischen Moduln :

$$e_{mi} = \begin{pmatrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

wobei bei 20°C folgende Werte gelten :

$$e_{11} = -0.171 \text{ Cm}^{-2} \quad e_{14} = 0.041 \text{ Cm}^{-2}$$

bei Temperaturkoeffizienten von :

$$TK(e_{11}) = 1.6 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \text{ bei } 20^\circ\text{C} \quad TK(e_{14}) = 14.4 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \text{ bei } 20^\circ\text{C}$$

In den entsprechenden, nach S_i aufgelösten Gleichungen treten die piezoelektrischen Koeffizienten auf :

$$d_{mi} = \begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

wobei bei 20°C folgende Werte gelten :

$$d_{11} = -2.30 \cdot 10^{-12} \text{ CN}^{-1} \quad d_{14} = -0.67 \cdot 10^{-12} \text{ CN}^{-1}$$

bei einem Temperaturkoeffizienten von :

$$TK(d_{11}) = 2.15 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \text{ bei } 20^\circ\text{C} \quad TK(d_{14}) = -12.9 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \text{ bei } 20^\circ\text{C}$$

⁵⁸ Näheres dazu in Gagnepain, J.J., Besson, R., in Band 11 von Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, S. 245 ff.

⁵⁹ da in "Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz" auf Seite 57 die Amplitude der resonanten Schwingung errechnet werden soll, welche ohne Dämpfung unendlich groß würde

⁶⁰ Die Daten für Elastizitätskoeffizienten, Elastizitätsmoduln nebst den zugehörigen Temperaturkoeffizienten finden sich in Tichy, J., Gautschi, G., Piezoelektrische Meßtechnik, Springer 1980

⁶¹ Die Bezeichnungen Modul und Koeffizient gehen in der Literatur durcheinander. Um in Gleichung (26) sowohl von Elastizitätsmodul als auch von piezoelektr. Modul zu sprechen, gebrauche ich die Terminologie von Kittel, Ch., Einführung in die Festkörperphysik, 5.Auflage, R. Oldenbourg Verlag 1980

⁶² Zur Herleitung siehe Gagnepain, J.J., Besson, R., in Band 11 von Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, S. 245 ff.

⁶³ Die Daten stammen aus Tichy, J., Gautschi, G., Piezoelektrische Meßtechnik, Springer 1980, die Vorzeichen wurden gemäß IRE-Standard 1949 (Quelle Standards on Piezoelectric Crystals 1949, Proc. Inst. Radio Engrs, New York 37, 1378 (1949)) für Rechtsquarz angegeben.

4.0 DER AT-QUARZ

4.1 DER AT-SCHNITT

Die technische Bedeutung des Quarzes liegt hauptsächlich in seinen besonderen piezoelektrischen Eigenschaften begründet. Quarz-Kristalle sind als frequenzstabilisierende Oszillatoren wichtige Bausteine in elektronischen Schaltungen für Frequenz- und Zeitmessungen. Die Resonanzfrequenz muß gegenüber Temperaturschwankungen sehr stabil sein und es sollte ferner keine dicht neben der Resonanzfrequenz liegenden Nebenresonanzen geben.

4.1.1 Die AT-Schnitt Orientierung

Schneidet man aus einem Quarz-Kristall Plättchen mit unterschiedlicher Neigung in Bezug auf die x-, y- und z-Achse heraus, so erhält man Oszillatoren mit unterschiedlichen mechanischen Schwingungsmoden und charakteristischen Stabilitätseigenschaften. In Abbildung 22 werden einige bedeutende Quarz-Schnitte dargestellt :

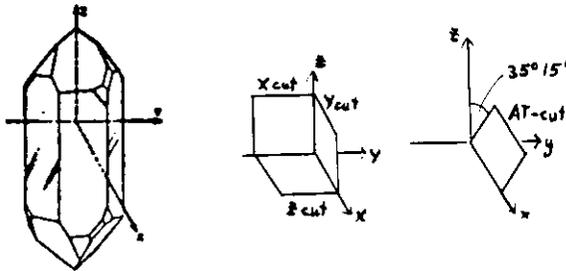


Abbildung 22. Darstellung einiger wichtiger Quarz-Schnitte: Dabei gilt :

- X-, Y- und Z-Schnitte haben als Flächennormalen die x-, y- bzw. die z-Achse.
- Der AT-Schnitt ist ein rotierter Y-Schnitt, d.h. die AT-Schnitt-Flächennormale y' erhält man aus der Y-Schnitt-Flächennormale y durch eine Drehung um die x-Achse um 35.25° .

Der von uns hauptsächlich untersuchte Quarz⁶⁴ hatte eine Resonanzfrequenz von 1.040974 MHz mit einem garantierten Temperaturgang $\Delta f/f_0$ von $\pm 2 \cdot 10^{-5}$ im Bereich von -20° bis $+70^\circ$ C.

4.1.2 Koordinatentransformation

Ein Punkt, der im AT-Quarz in Bezug auf das AT-Achsenkreuz x, y', z' die Koordinaten $p_x, p_{y'}$ und $p_{z'}$ hat, hat im Quarz - System x, y, z die Koordinaten :

$$(28) \quad p_x \text{ unverändert}$$

$$(29) \quad p_{y'} = p_z \sin \varphi + p_y \cos \varphi$$

$$(30) \quad p_{z'} = p_z \cos \varphi - p_y \sin \varphi$$

mit $\varphi = -35.25^\circ$.

Beim Übergang vom x, y, z - ins x', y', z' - Koordinatensystem gilt :

$$(31) \quad p_x \text{ unverändert}$$

$$(32) \quad p_{y'} = p_z \sin \varphi + p_y \cos \varphi$$

$$(33) \quad p_{z'} = p_z \cos \varphi - p_y \sin \varphi$$

mit $\varphi = -35.25^\circ$.

Nach dieser Koordinatentransformation transformieren sich auch die verschiedenen elastischen Konstanten und Module und andere koordinatensystemabhängige Größen. Beispielsweise die primitiven Basisvektoren (siehe Abschnitt "Primitive Vektoren" auf Seite 45).

⁶⁴ hergestellt von der KVG Neckarbischofsheim

4.2 ORIENTIERUNGEN VON EBENEN UND VEKTOREN IM AT-QUARZ

4.2.1 Kristallografische Ebenen

In Abbildung 23 werden die wichtigsten kristallografischen Ebenen im Quarz in Bezug auf die oben eingeführten Schnitte angegeben.

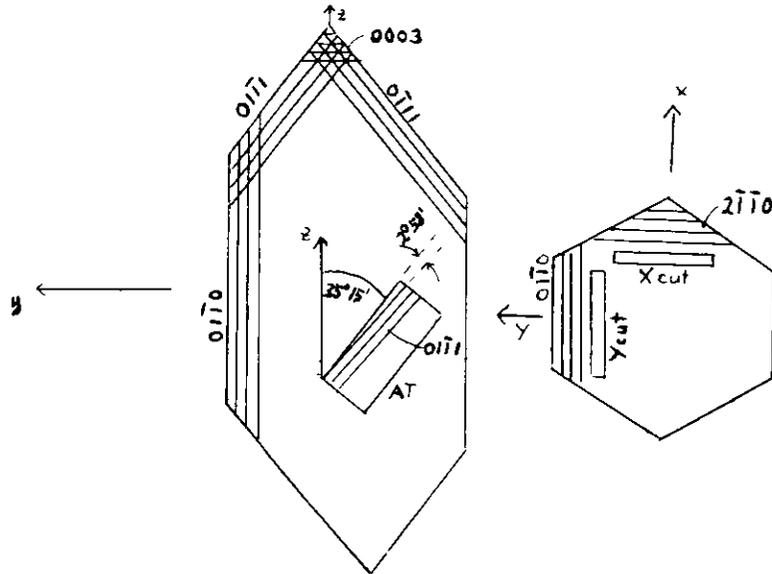


Abbildung 23. Kristallografische Ebenen im Quarz

4.2.2 Primitive Vektoren

Bei der Untersuchung von Versetzungsbewegungen in Bezug auf die kristallografischen Orientierungen kann man entweder die erhaltenen Werte ins x,y,z -System transformieren (dazu die Formeln in Abschnitt "Koordinatentransformation" auf Seite 44) und dann mit den in Kapitel "Struktur der Einheitszelle" auf Seite 34 definierten primitiven Vektoren vergleichen oder aber man bestimmt die Lage der primitiven Vektoren im AT-System : letzteres soll im folgenden geschehen

Die primitiven Basisvektoren seien dabei wie bisher mit $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3, \vec{c}$, die reziproken primitiven Basisvektoren mit $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ bezeichnet. Es gilt :

	Koord. im xyz -System	\rightarrow	$xy'z'$ -System
(34)	$\vec{a}_1 = \vec{a}_1 (1, 0, 0)$	\rightarrow	$\vec{a}_1 (1, 0, 0)$
(35)	$\vec{a}_2 = \vec{a}_1 (-1/2, \sqrt{3}/2, 0)$	\rightarrow	$\vec{a}_2 (-1/2, 1/\sqrt{2}, -1/2)$
(36)	$\vec{a}_3 = \vec{a}_1 (-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	\rightarrow	$\vec{a}_3 (-1/2, -1/\sqrt{2}, 1/2)$
(37)	$\vec{c} = \vec{c} (0, 0, 1)$	\rightarrow	$\vec{c} (0, 0,577, 0,817)$

und für die reziproken Vektoren :

(38)	$\vec{A} = \vec{a}_1^{-1} (1, 1/\sqrt{3}, 0)$	\rightarrow	$\vec{A}^{-1} (1, 0,4715, -1/3)$
(39)	$\vec{B} = \vec{a}_1^{-1} (0, 2/\sqrt{3}, 0)$	\rightarrow	$\vec{B}^{-1} (0, 0,943, -2/3)$
(40)	$\vec{C} = \vec{c}^{-1} (0, 0, 1)$	\rightarrow	$\vec{C}^{-1} (0, 0,577, 0,817)$

Zur Veranschaulichung der Lage dieser primitiven Vektoren wird ihre Projektion in die drei wichtigsten Ebenen in den folgenden Abbildungen dargestellt :

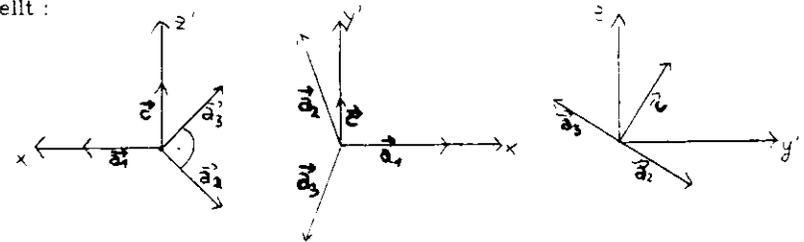


Abbildung 24. Projektion der primitiven Basisvektoren

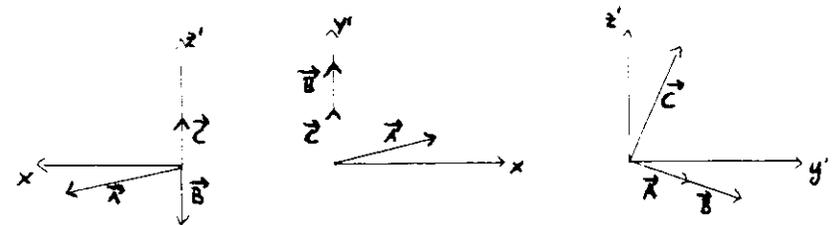


Abbildung 25. Projektion der reziproken primitiven Basisvektoren

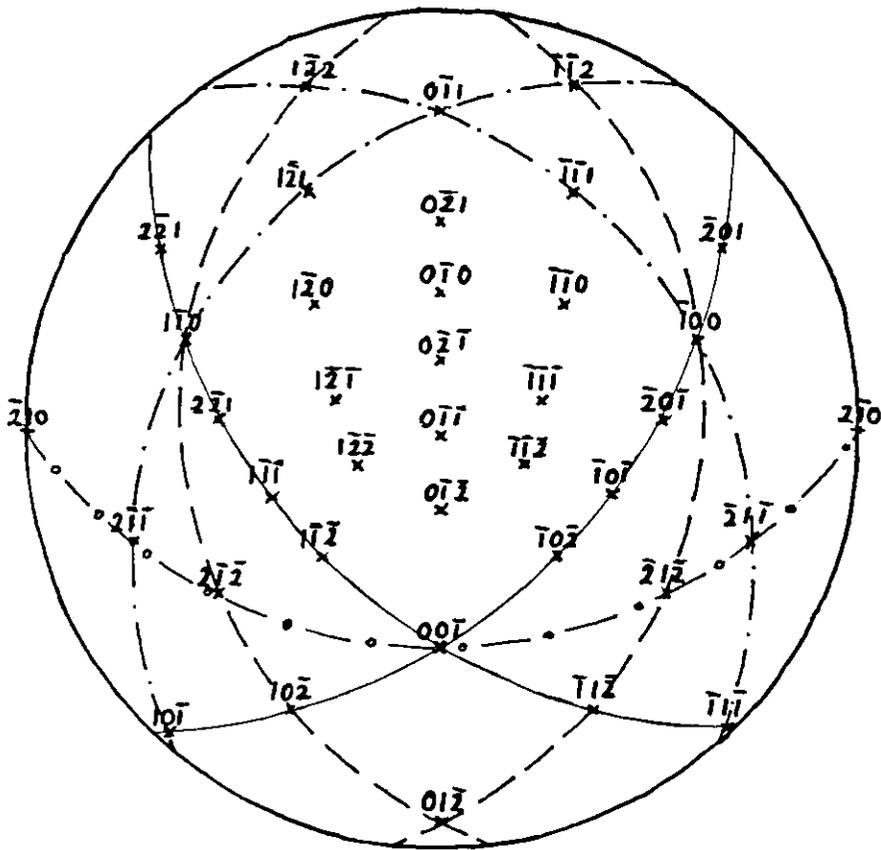


Abbildung 28. Die stereografische Projektion eines AT-Quarzes:
RS = 79mm.

Diese stereografische AT-Projektion dient als Grundlage zur Konstruktion von Laue-pattern.

In Tab. 4 sind die Polarkoordinaten wichtiger Reflexe für einige Abstände von Quelle zu Quarz aufgeführt, die nach

$$(41) \quad A = D \cdot \tan(\pi - 4 \arctan(S / RS))$$

mit A = Abstand der Reflexes vom Zentrum des Laue-patterns

D = Abstand Quarz - Film

S = Abstand eines Punktes vom Zentrum der stereografische Ebene

RS = Radius der stereografische Ebene

berechnet wurden. Der Winkel ϕ (gemessen gegen $2\bar{1}0$) bleibt erhalten.

Reflex	ϕ	S [mm]	A [mm]	A [mm]	A [mm]	A [mm]	A [mm]
			D=50mm	D=40mm	D=35mm	D=32.5mm	D=30mm
01-2	-90°	74	6.6	5.3	4.6	4.3	3.9
00-1	-90°	40	159.4	127.5	111.6	103.6	95.6
10-2	-118°	60	30.2	24.1	21.1	19.6	18.1
-11-2	-62°	60	30.2	24.1	21.1	19.6	18.1
2-1-2	-144°	52.5	51.0	40.8	35.7	33.2	30.6
-21-2	-36°	52.5	51.0	40.8	35.7	33.2	30.6
2-1-1	-160°	62.5	25.0	20.0	17.5	16.3	15.0
-21-1	-20°	62.5	25.0	20.0	17.5	16.3	15.0
10-1	-132°	77	2.6	2.1	1.8	1.7	1.5
-11-1	-48°	77	2.6	2.1	1.8	1.7	1.5
2-2-1	178°	42.5	117.1	93.7	82.0	76.1	70.3
-20-1	2°	42.5	117.1	93.7	82.0	76.1	70.3
1-1-0	161°	51.5	54.8	43.8	38.3	35.6	32.8
-10-0	19°	51.5	54.8	43.8	38.3	35.6	32.8
2-2-1	148°	63.5	23.1	18.5	16.2	15.0	13.9
-20-1	32°	63.5	23.1	18.5	16.2	15.0	13.9
1-2-1	119°	51	56.8	45.0	39.7	36.9	34.1
-1-1-1	61°	51	56.8	45.0	39.7	36.9	34.1
1-2-2	111°	70	12.3	9.8	8.6	8.0	7.4
-1-1-2	69°	70	12.3	9.8	8.6	8.0	7.4
0-2-1	90°	39	185.4	148.4	129.7	120.5	111.2
0-1-1	90°	60	30.2	24.1	21.1	19.6	18.1

Tabelle 4. Standard AT-Laue-pattern

Ausgehend von einer stereografischen Ebene mit $RS=79\text{mm}$ wurden die Polarkoordinaten der wichtigsten Reflexe berechnet. Der Polarwinkel ϕ bleibt erhalten, der Abstand vom Durchstoßungspunkt des direkten Strahles A variiert mit dem Abstand D von Quarz zu Film; S = Abstand vom Zentrum der stereografischen Ebene.

Graphisch dargestellt wird die Rechnung in Abbildung 29 für einen Abstand von $D = 35\text{mm}$. Dieses Laue-pattern entspricht dem Topogramm von Abbildung 30 auf Seite 52, zu dem zur Anschauung ein einzelner Reflex in Abbildung 31 auf Seite 52 vergrößert dargestellt wurde.

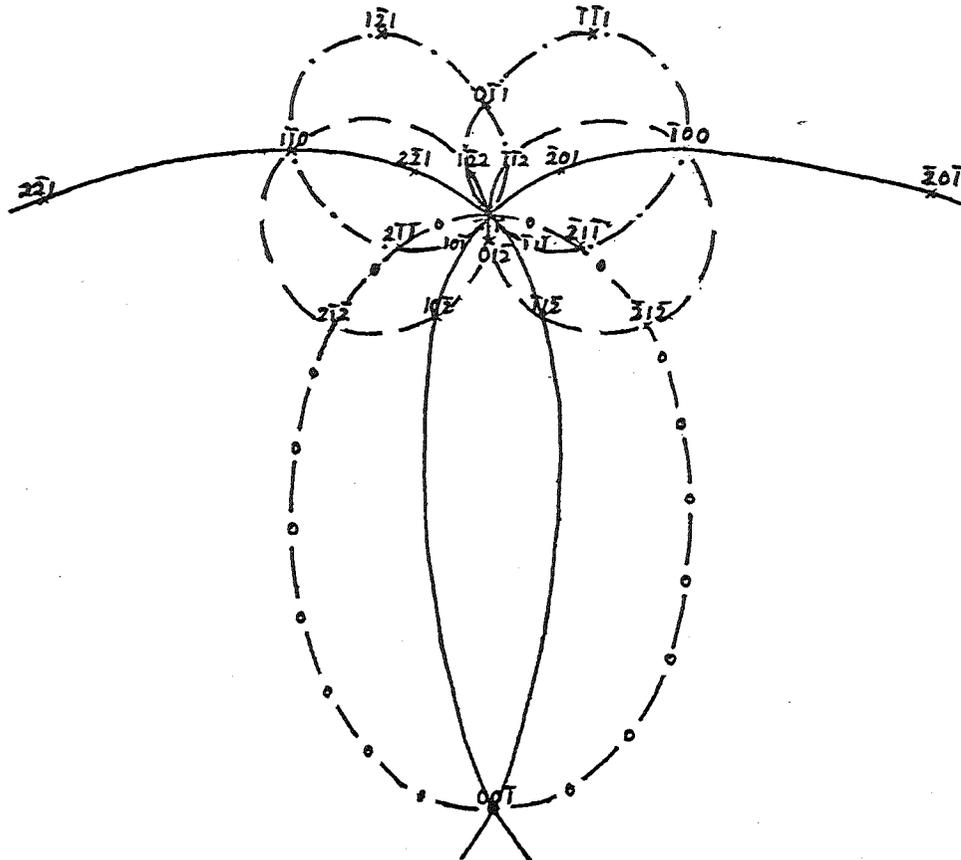


Abbildung 29. Graphisch konstruiertes AT-Quarz Laue-pattern (1): $D=35\text{mm}$; Blickrichtung mit dem Strahl.

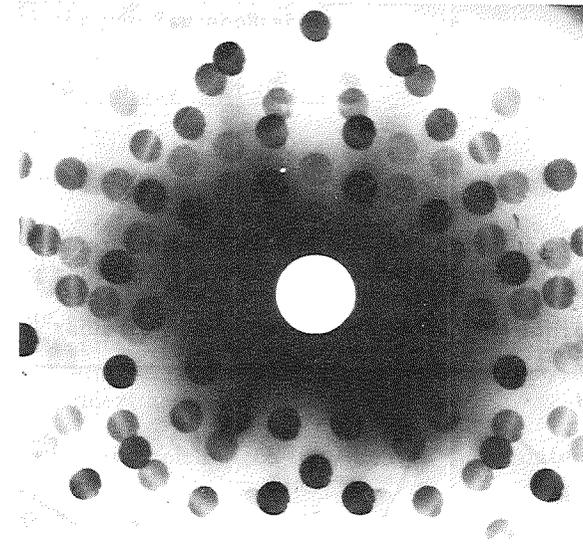


Abbildung 30. Laue-pattern eines AT-Quarzes: $D = 35\text{mm}$.

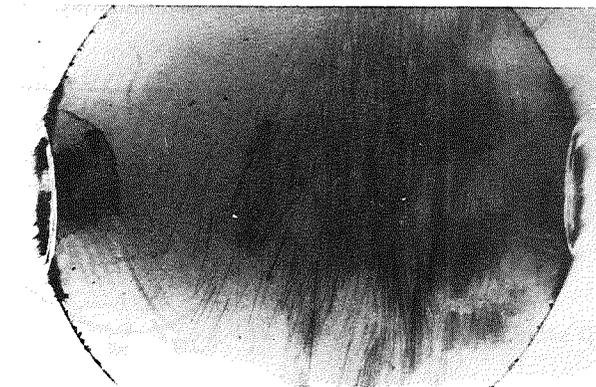


Abbildung 31. $10\bar{1}$ -Reflex eines AT-Quarzes

4.4 GITTERDYNAMIK DES AT-QUARZES

Die allgemeinen Formeln des elastischen und piezoelektrischen Verhaltens von α -Quarz (siehe "Kristallgitterdynamik" auf Seite 38 Formeln (10) bis (28)) sollen nun für den Spezialfall eines AT-Quarzes formuliert werden.

4.4.1 Schwingungsformen

4.4.1.1 Die Grundmode

Betrachtet werde zunächst eine Quarz-Platte des Y-Schnittes (siehe "Die AT-Schnitt Orientierung" auf Seite 43), bei der ein elektrisches Wechselfeld in y-Richtung angelegt sei. Die Abhängigkeit der Verzerrung T_1 vom angelegten Feld E_2 vereinfacht sich aufgrund der speziellen Werte der Matrix der piezoelektrischen Moduln (siehe "Piezoelektrische Konstanten" auf Seite 41) zu :

$$(42) \quad T_3 = e_{14}E_2$$

und

$$(43) \quad T_6 = e_{11}E_2$$

Diese Gleichungen beschreiben die sogenannten face-shear und thickness-shear Schwingungsmoden :

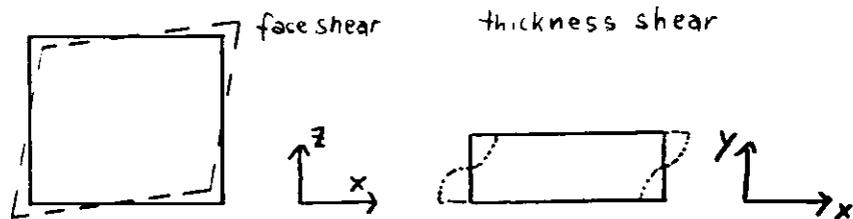


Abbildung 32 Face-shear vs. thickness-shear Schwingungsmoden

In der praktischen Anwendung von Quarz als Resonator ist eine möglichst saubere Schwingung, frei von Nebenresonanzen, erwünscht. Eine Entkopplung von face-shear und thickness-shear Mode erzielt man durch spezielle Wahl des Kristallschnittes. Bei der dabei durchgeführten Koordinatentransformation verschwindet der Koeffizient zur Verzerrung T_3

beim sogenannten AC-Schnitt. Auch beim AT-Schnitt ist (wie Abbildung 33 schematisch zeigt) die Kopplung zwischen face-shear und thickness-shear Mode noch sehr gering ; in den nachfolgenden Berechnungen wurde die face-shear Mode deshalb vernachlässigt. Der Vorteil des AT- gegenüber dem AC-Schnitt ist sein geringerer Temperaturkoeffizient (siehe schematisch dazu Abbildung 34).

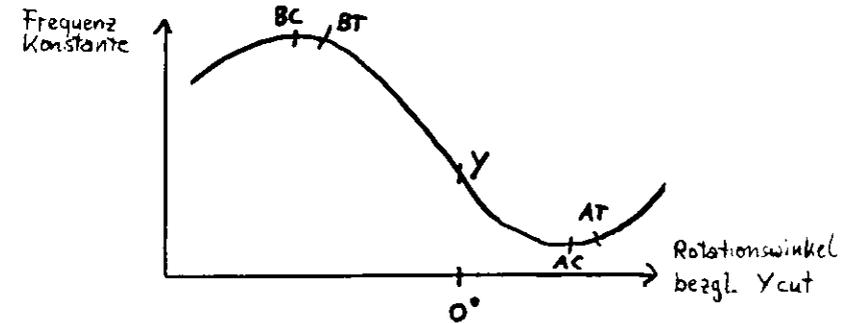


Abbildung 33. Nebenmoden-Kopplung rotierter Y-Schnitte: In den Extrema der Kurve ist die Kopplung zwischen face-shear und thickness-shear Mode minimal.

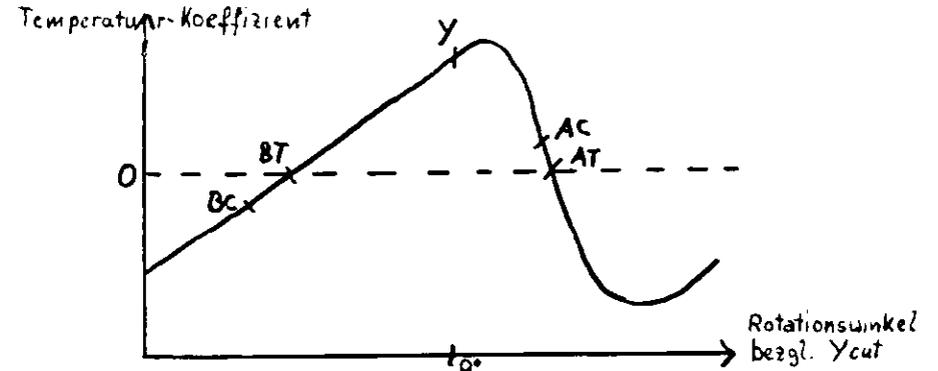


Abbildung 34. Temperaturkoeffizienten rotierter Y-Schnitte

Abbildung 35 auf Seite 55 zeigt noch einmal perspektivisch die Form einer thickness-shear-Schwingung in Bezug zu den Koordinatensystemen.

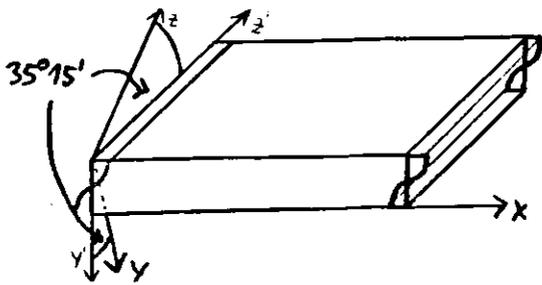


Abbildung 35. Die thickness-shear-Schwingungs-Mode

4.4.1.2 Die Nebenmoden

Das bisher Gesagte gilt genau genommen nur für eine in x- und z'-Richtung unendlich ausgedehnte AT-Platte (der Dicke d). Weitere Plattenbegrenzungen, Elektrodenformen, Anschlüsse und ähnliche Spezifikationen bedingen (als Randbedingungen in die Bewegungsgleichungen eingehend) eine Kopplung zwischen der Grundmode thickness-shear und Nebenmoden, wie hauptsächlich flexure und thickness-twist.

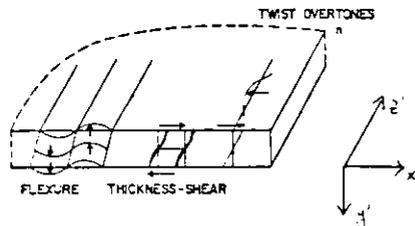


Abbildung 36. Nebenmoden zur thickness-shear Grundmode

Eine ausführliche Theorie dieser Schwingungsformen wurde in den sechziger Jahren von R.D.Mindlin und Mitarbeitern entwickelt.⁶⁵ Neuere Arbeiten dazu wurden von Wallace et al. durchgeführt.⁶⁶ Zum Einfluß von Elektrodenformen siehe beispielsweise die Arbeiten von Byrne et al.⁶⁷

⁶⁵ Mindlin, R.D., Spencer W.J., J. Acoust. Soc. Am. vol.42, no.6, S.1268 - 77 (1967)

⁶⁶ Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1827-42 (1975) und Goodall, F.N., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1843-50 (1975)

⁶⁷ Byrne, R.J., Lloyd, P., Spencer, W.J., J. Acoust. Soc. Am., vol.43, no.2, S. 232-38 (1968)

4.4.2 Schwingungsgleichung in AT-Quarz

4.4.2.1 Allgemeine Gleichung

Bei der Berechnung der Schwingungen in AT-Quarz kann man entweder die in "Kristallgitterdynamik" auf Seite 38 hergeleiteten Gleichungen entsprechend der Koordinatentransformation umformen oder aber man behält besser die Form der Gleichungen bei und transformiert dafür die Konstanten und Moduln. Letzterer Weg soll im folgenden besprochen werden und so sind alle folgenden Konstanten und Moduln bereits als ins AT-System transformiert anzusehen.

Die spezialisierten Grundgleichungen für einen AT-Quarz unter einem elektrischen Feld in y'-Richtung lauten dann :^{68 69}

$$(44) \quad T_\theta = C_{66}S_\theta - e_{26}E_2 + r_{66}(\partial S_\theta/\partial t)$$

$$(45) \quad D_2 = e_{26}S_\theta + \epsilon_{22}E_2$$

$$(46) \quad S_\theta = \partial u_1/\partial y$$

dazu die Bewegungsgleichung

$$(47) \quad \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \frac{\partial T_\theta}{\partial y}$$

Einsetzen ergibt :

$$(48) \quad \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \left(C_{66} + \frac{e_{26}^2}{\epsilon_{22}} \right) \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + r_{66} \frac{\partial^3 u_1}{\partial y^2 \partial t}$$

mit

$$\begin{aligned} \rho &= 2.65 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3 & C_{66} &= 29.01 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2 \\ e_{26} &= -0.095 \text{ C/m}^2 & \epsilon_{22} &= 40.32 \cdot 10^{-12} \text{ F/m} \\ r_{66} &= 5.3 \cdot 10^{-2} \text{ kg/ms} & & \text{(folgt aus Kristallgüte } Q = 8.5 \cdot 10^4) \end{aligned}$$

⁶⁸ Da im folgenden stets im AT-System gerechnet wird, bei dem nur gestrichene Größen auftreten, verzichte ich ab jetzt in diesem Kapitel grundsätzlich auf alle Striche an den physikalischen Größen.

⁶⁹ siehe Gagnepain, J.J., Besson, R., in Band 11 von Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, S.278

Der Lösungsansatz lautet :

$$(49) \quad u_1 = A(y)\cos\omega t + B(y)\sin\omega t$$

mit den Randbedingungen :

1. $u_1 = 0$ für $y=0$ (Grundwelle)
2. $T_6 = 0$ für $y=\pm d/2$ (freie Oberfläche, $d =$ Kristalldicke)

$$3. \quad \int_{-d/2}^{d/2} E_2 dy = V_0 \cos\omega t$$

4.4.2.2 Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz

Eine Berechnung von W.Graeff⁷⁰ ergibt für den von uns untersuchten Quarz die folgenden Resultate :

$$(50) \quad A(y) = a \cdot \sin ky \cdot \cosh \delta y - b \cdot \cos ky \cdot \sinh \delta y$$

$$(51) \quad B(y) = b \cdot \sin ky \cdot \cosh \delta y + a \cdot \cos ky \cdot \sinh \delta y$$

mit

$$\begin{aligned} a &= -1.002 \cdot 10^{-9} \text{ m/V} \cdot U_0 \\ b &= 1.127 \cdot 10^{-7} \text{ m/V} \cdot U_0 \\ k &= 1969.707 \text{ m}^{-1} \\ \delta &= -1.168 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-2} \\ |\cosh \delta y - 1| &\leq 4 \cdot 10^{-11} \\ |\sinh \delta y| &\leq 10^{-5} \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} A(y) &\approx -1.002 \cdot 10^{-9} \text{ m/V} \cdot U_0 \cdot \sin ky \\ B(y) &\approx 1.127 \cdot 10^{-7} \text{ m/V} \cdot U_0 \cdot \sin ky \\ A'(y) &\approx -1.937 \cdot 10^{-6} \text{ V}^{-1} \cdot U_0 \cdot \cos ky \\ B'(y) &\approx 2.219 \cdot 10^{-4} \text{ V}^{-1} \cdot U_0 \cdot \cos ky \\ A''(y) &\approx 3.886 \cdot 10^{-3} \text{ V}^{-1} \cdot U_0 \cdot \sin ky \\ B''(y) &\approx -0.4371 \text{ V}^{-1} \cdot U_0 \cdot \sin ky \end{aligned}$$

Mit diesen Daten ergeben sich die folgenden wichtigen physikalischen Funktionen für den untersuchten Quarz :

Aus dem Verhältnis von $A(y)$ zu $B(y)$ berechnet sich der Phasenwinkel zu :

$$(52) \quad \varphi = 89.49^\circ$$

Bei einer Cosinus-förmigen äußeren Spannung ergibt sich pro Volt Amplitude :

$$(53) \quad u_1(y) \approx 0.1 \mu\text{m} \sin ky \sin \omega t$$

$$(54) \quad S_6(y) \approx 2.2 \cdot 10^{-4} \cos ky \sin \omega t$$

$$(55) \quad S_8'(y) \approx -0.44 \text{ m}^{-1} \sin ky \sin \omega t$$

Für das elektrische Feld folgt :

$$(56) \quad E_2(y) \approx 5.26 \cdot 10^5 \text{ V/m} (\cos ky - 0.63) \sin \omega t$$

und das entsprechende Potential ist :

$$(57) \quad U(y) \approx (-267 \text{ V} \sin ky + 332 \text{ V/mm} \cdot y) \sin \omega t$$

mit $U_{\max} \approx 65 \text{ V}$

Diese Funktionen werden in ihrem Verlauf durch die Dicke des Quarzes in den folgenden Abbildungen dargestellt.

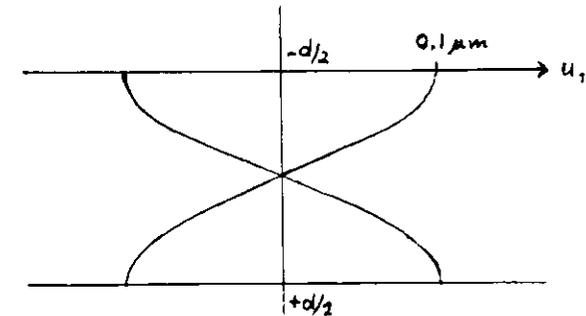


Abbildung 37. Verschiebung im Quarz unter äußerem Feld: dargestellt als Funktion von y .

⁷⁰ W. Graeff, persönliche Mitteilung

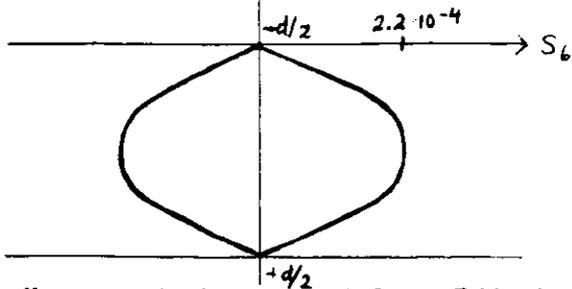


Abbildung 38. Verzerrung im Quarz unter äußerem Feld: dargestellt als Funktion von y' .

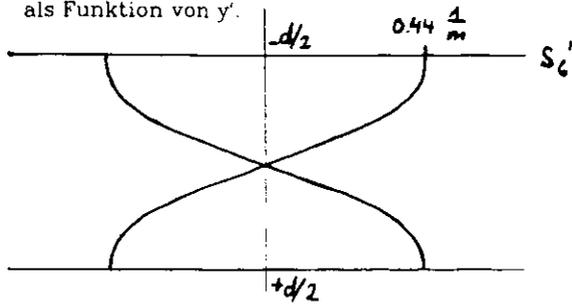


Abbildung 39. 1. Ableitung der Verzerrung im Quarz unter äußerem Feld: dargestellt als Funktion von y' .

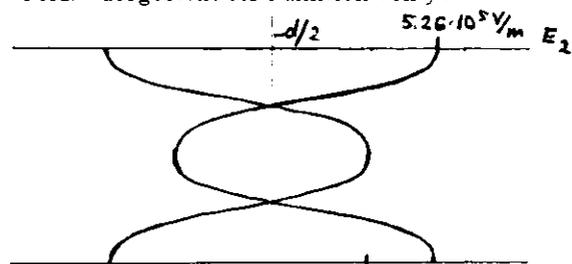


Abbildung 40. Elektrisches Feld im Quarz unter äußerem Feld: dargestellt als Funktion von y' .

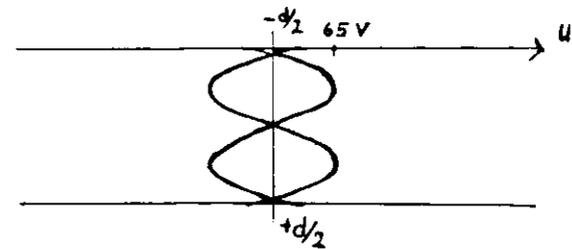


Abbildung 41. Potentialverlauf im Quarz unter äußerem Feld: dargestellt als Funktion von y' .

VERSETZUNGEN

5.0 ALLGEMEINE GRUNDLAGEN

5.1 DIE ENTSTEHUNG DES KONZEPTEES VON VERSETZUNGEN

Makroskopisch beobachtete Scherungen von Metallproben wurden bereits Ende des 19. Jahrhunderts durch die Annahme von Gitterfehlordnungen erklärt.⁷¹ Einen endgültigen Ansatz, der auf das heute noch bestehende Konzept von Versetzungen führte, fand man jedoch erst Anfang des 20. Jahrhunderts. Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment auf den Feldern der Röntgenbeugung und der Elastizitätslehre machen es nötig, eine nichtideale Einkristall-Struktur anzunehmen.

5.1.1 Die erste Diskrepanz : Die Röntgen-Reflektivität

Nachdem eine Theorie der Röntgenbeugung entwickelt war, stellte man fest, daß unter der Annahme, die Proben hätten eine perfekte Einkristallstruktur, die beobachtete Intensität der reflektierten Strahlen 20mal zu hoch war und die beobachtete Reflektionsbreite 1 - 30 Winkelminuten statt einiger Winkelsekunden betrug.⁷²

Eine Erklärung lieferte die Annahme, der Kristall habe eine Mosaikstruktur, bestehend aus Kristalliten von etwa 10^{-4} bis 10^{-5} cm Durchmesser, die zueinander eine leichte Fehlorientierung aufwiesen.

5.1.2 Die zweite Diskrepanz : Das Scherverhalten

Die klassische Elastizitätslehre geht von folgenden Annahmen aus: Für die Scherspannung gilt :

⁷¹ Mügge, O., Neues Jahrbuch Min., 13 (1883) und Ewing, A., Rosenhain, W., Phil. Trans Roy. Soc. A193,353(1899)

⁷² Darwin, C.G., Phil. Mag. 27: 315, 675 (1914) und Ewald, P.P., Ann. Phys., 54: 519 (1917)

$$(1) \quad F_s = \sigma \cdot A$$

mit
 F_s = Scherkraft in der Fläche A
 σ = Scherspannung
A = Fläche mit Normalenvektor \vec{n}

Für kleine Winkel gilt das Hookesche Gesetz :

$$(2) \quad \sigma = \mu \cdot \tan \alpha$$

mit μ = Torsionsmodul
(für isotropen festen Körper gilt : $\mu = E/2(1 - \chi)$
mit E = Elastizitätsmodul und χ = Poisson-Koeffizient)

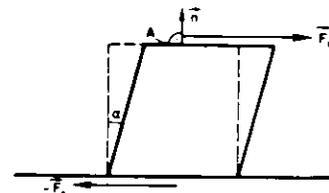


Abbildung 42. Zur Geometrie der Scherspannung

Bei der Übertragung auf einen - idealen - Kristall ging Frenkel von der Annahme aus,⁷³ daß die zur Deformation nötige Spannung periodisch entsprechend dem Gitter in Verschiebungsrichtung sei :

$$(3) \quad \sigma = \sigma_{\text{theor.}} \cdot \sin(2\pi x/b)$$

mit b = primitiver Translationsvektor in der Fläche A

woraus man für kleine Auslenkungen folgern kann :

$$(4) \quad \sigma = \sigma_{\text{theor.}} \cdot 2\pi x/b$$

Um eine plastische Deformation zu erzeugen, d.h. um sämtliche Atome einer Netzebene gegenüber der darunterliegenden um einen Gitterabstand zu verschieben, ist hiernach also eine Spannung $\sigma_{\text{theor.}}$ erforderlich. Einsetzen in die Hookesche Gleichung

$$(5) \quad \sigma = \mu \cdot x/d \quad (\text{mit } d = \text{Gitterabstand der Ebenen A}) \text{ liefert}$$

$$(6) \quad \sigma_{\text{theor.}} \approx \mu/6$$

⁷³ Frenkel, J., Z. Phys., 37: 572 (1926)

⁷⁴ unter genauerer Diskussion etwa $\mu/15$.

Entgegen dieser sicherlich sehr groben Abschätzung⁷⁴ beginnt die plastische Deformation im Extremfall schon bei $10^{-9}\mu$.⁷⁵

5.1.3 Das Lösungskonzept : Stufen- und Schraubenversetzungen

Zur Erklärung dieser Diskrepanzen wurden verschiedene Versetzungstypen vorgeschlagen, von denen sich die Stufenversetzung⁷⁶ und die Schraubenversetzung⁷⁷ schließlich zur Erklärung durchsetzten. Die folgende Abbildung 43⁷⁸ und Abbildung 44 auf Seite 64⁷⁹ zeigen für einen einfachen Gittertyp das Prinzip dieser Versetzungsarten :

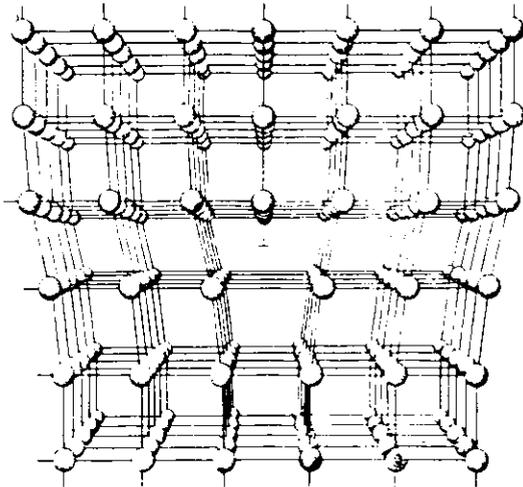


Abbildung 43. Darstellung einer Stufenversetzung im einfachen kubischen Gitter

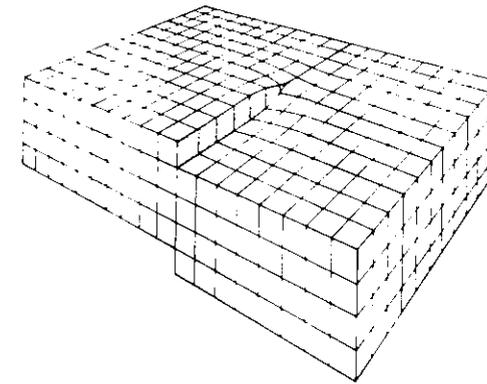


Abbildung 44. Darstellung einer Schraubenversetzung im einfachen kubischen Gitter

5.2 VERSETZUNGSSTATIK IM KRISTALLGITTER

5.2.1 Elementare Geometrie von Versetzungen

Zur Theorie von Versetzungen gibt es umfangreiche Arbeiten, von denen als zur Übersicht besonders geeignet das Buch Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968 zu empfehlen ist.

Aus den verschiedenen Theorien sollen im folgenden nur die grundlegenden Konzepte herausgezogen werden, die zur Interpretation bzw. Einschätzung der Meßergebnisse wichtig sind. Zur Veranschaulichung der Begriffe werden diese hauptsächlich auf der Basis der elastischen Kontinuumstheorie definiert.

5.2.1.1 Der Burgers-Vektor

Zur quantitativen Beschreibung von Versetzungen hat sich das Konzept

⁸⁰ Quelle : Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968.S.21

⁷⁵ Tinder, R.F., Washburn, J., Acta Met., 12: 129 (1964), Experimente an Kupfer

⁷⁶ vorgeschlagen durch Orowan, E., Z. Phys., 89: 605, 634 (1934), Polanyi, M., Z. Phys., 89: 660 (1934) und Taylor, G.I., Proc. Roy. Soc., A145 : 362 (1934)

⁷⁷ erarbeitet von Burgers, J.M., Proc. Kon. Ned. Akad. Wetenschap., 42 : 293, 378 (1939)

⁷⁸ Quelle : Weißmantel, C.H., Hamann, C., Grundlagen der Festkörperphysik, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1979, S.192

⁷⁹ Quelle : Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968.S.9

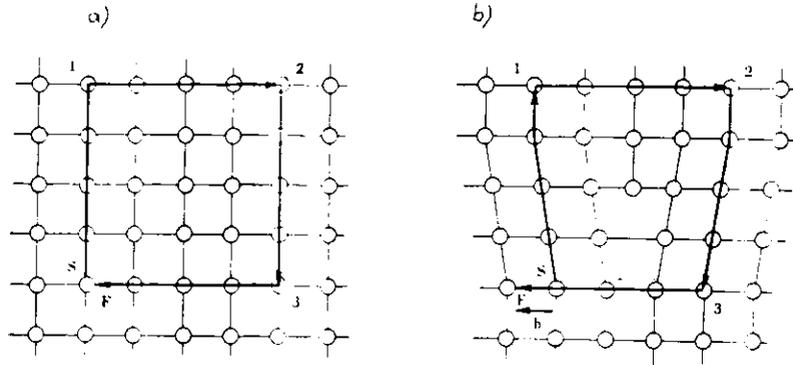


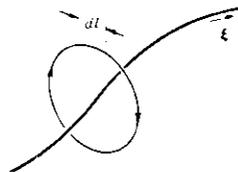
Abbildung 45. Zur Definition des lokalen Burgers-Vektors: Definition im Sinne der \overline{SF}/RH ($RH=Rechte\ Hand\ System$) Konvention; Weg im a) perfekten b) imperfekten Kristall; Die Richtung der Versetzung ξ zeigt in die Zeichenebene, die Wege verlaufen im Uhrzeigersinn.

des Burgers-Vektors als besonders tauglich erwiesen. Der lokale Burgers-Vektor ist gemäß Abbildung 45 auf Seite 65⁸⁰ definiert: Nachdem man im perfekten Kristall im Uhrzeigersinn einen geschlossenen Weg um die in die Zeichenebene hineingehende Versetzung zurückgelegt hat, geht man diesen Weg nun auch im imperfekten Kristall. Der eingezeichnete Vektor \overline{SF} ist der lokale Burgers-Vektor, definiert nach der sog. \overline{SF}/RH Konvention.⁸¹

Eine äquivalente Formulierung ist die folgende:

Der lokale Burgers-Vektor ist gegeben durch das in Bezug auf die Richtung der Versetzung ξ im Sinne eines Rechtssystems durchlaufene geschlossene Linienintegral der durch die Versetzung verursachten elastischen Auslenkung \vec{u} um die Versetzung:

$$(7) \quad \vec{b} = \oint \partial \vec{u} / \partial l \, dl$$



⁸¹ Zur allgemeinen Definition und zu abweichenden Konventionen siehe Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968 S 22 f.

5.2.1.2 Endpunkte von Versetzungen

Das Konzept von Stufen- und Schraubenversetzungen erlaubt in Verbindung mit der Definition von Burgers-Vektoren folgende Aussagen:

Eine Versetzung kann nicht an einer ansonsten perfekten Stelle des Kristalles enden. Endpunkte sind möglich:

- an der Oberfläche,
- an einer anderen Versetzung,
- an einer Korngrenze,
- oder an einem sonstigen Defekt.

5.2.1.3 Richtung des Burgers-Vektors in Bezug auf die Versetzungsrichtung

- Für eine reine Schraubenversetzung ist \vec{b} parallel zu ξ .
- Für eine reine Stufenversetzung ist \vec{b} senkrecht zu ξ .
- es kann durchaus gemischte Versetzungen geben, ebenso wie eine Schraubenversetzung durch Richtungsänderung in eine Stufenversetzung übergehen kann und umgekehrt.

Der Burgers-Vektor hat dann eine Schrauben-Komponente \vec{b}_s ($s=screw$) und eine Stufen-Komponente \vec{b}_e ($e=edge$):

$$(8) \quad \vec{b}_s = (\vec{b} \cdot \xi) \xi$$

$$(9) \quad \vec{b}_e = \vec{b} - \vec{b}_s$$

5.2.1.4 Aufspaltung einer Versetzung

Bei einer Aufspaltung einer Versetzung mit Burgers-Vektor \vec{b}_1 in zwei Versetzungen mit Burgers-Vektoren \vec{b}_2 und \vec{b}_3 gilt :

$$(10) \quad \vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$$

Dieses kann erweitert werden zu der Aussage :

Werden alle $\vec{\xi}_i$ als positiv gerechnet, wenn sie von einem Versetzungsknoten weggehen, so gilt für die Gesamtheit der N Burgers-Vektoren \vec{b}_i :

$$(11) \quad \sum_{i=1}^N \vec{b}_i = 0.$$

5.2.2 Selbstenergie einer Versetzung

Ein Kristall, der Kristallbaufehler aufweist, hat gegenüber dem perfekten Kristall eine höhere Energie. Unter der Selbstenergie eines Defektes - hier speziell einer Versetzung - versteht man den Energieaufwand, der nötig ist, um den Defekt in einem ursprünglich idealen Kristall zu erzeugen.

Zur modellmäßigen Behandlung von Versetzungsbewegungen hat es sich bewährt, bei der Betrachtung der Auswirkung einer Versetzung auf die Kristallumgebung zwischen einem Nah- und einem Fernbereich zu unterscheiden.

Die Selbstenergie wird entsprechend in eine Selbstenergie des Nahbereiches, des sogenannten Versetzungskernes, und eine Selbstenergie des Fernbereiches der Umgebung der Versetzung aufgespalten :

$$(12) \quad W_s = W_{sk}(\text{Kern}) + W_{st}(\text{Umgebung})$$

5.2.2.1 Der Kern einer Versetzung

Wie der Kern einer Versetzung definiert ist, soll für den einfachen Fall einer Versetzung im kubischen Gitter in den folgenden Abbildungen dargestellt werden.⁸²

⁸² Quelle dieser Abbildungen : Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968, S.202, 203,208.

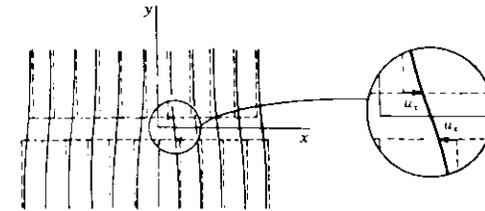


Abbildung 46. Darstellung einer Stufenversetzungsumgebung

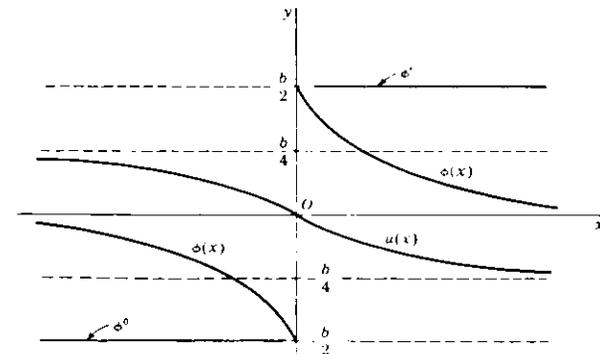


Abbildung 47. Gitterverzerrung als Funktion des Abstandes von der Versetzung: Für den Fall einer Stufenversetzung ist auf der Abszisse die Richtung x, für den Fall einer Schraubenversetzung die Richtung z aufgetragen.

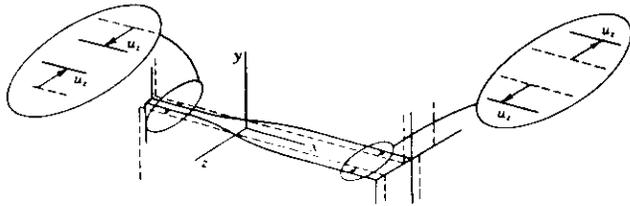


Abbildung 48. Darstellung einer Schraubenversetzungsumgebung

Die Gitterverzerrung nimmt, beginnend bei

$$(13) \quad \phi_x^0 = \begin{cases} b/2 & x > 0 \\ -b/2 & x < 0 \end{cases} \quad \text{für eine Stufenversetzung}$$

bzw.

$$(14) \quad \phi_z^0 = \begin{cases} b/2 & x > 0 \\ -b/2 & x < 0 \end{cases} \quad \text{für eine Schraubenversetzung}$$

stetig in der Form

$$(15) \quad \phi_x^0 = \begin{cases} b/2 + 2u_x(x) & x > 0 \\ -b/2 + 2u_x(x) & x < 0 \end{cases} \quad \text{für eine Stufenversetzung}$$

bzw.

$$(16) \quad \phi_z^0 = \begin{cases} b/2 + 2u_z(z) & x > 0 \\ -b/2 + 2u_z(z) & x < 0 \end{cases} \quad \text{für eine Schraubenversetzung}$$

ab

Als Kern der Versetzung⁸³ bezeichnet man den Bereich der Halbwertsbreite der Gitterverzerrung also :

$$(17) \quad |\phi_x(x)| > \phi_x^0 / 2 = b / 4 \quad \text{bzw}$$

$$(18) \quad |\phi_z(z)| > \phi_z^0 / 2 = b / 4$$

Der Radius dieses Bereiches werde als Versetzungsradius, ζ bezeichnet ; es gilt :

$$(19) \quad \zeta = d / (1 - \chi) \cdot \exp(-3/2) \quad \text{für eine Stufenversetzung.}$$

$$(20) \quad \zeta = d / e \quad \text{für eine Schraubenversetzung}$$

$$(21) \quad \zeta = d / e \left\{ \sin^2 \beta / \left[\exp(1/2) \cdot (1 - \chi) \right] + \cos^2 \beta \right\}$$

mit $e =$ Eulersche Konstante und $\beta =$ Winkel zwischen Versetzungsrichtung $\vec{\xi}$ und Burgers-Vektor \vec{b}

für den Fall einer gemischten Versetzung

5.2.2.2 Die Selbstenergie der Umgebung

Der Anteil W_{SU} , der von der Verzerrung des Gitters außerhalb des Versetzungskernes herrührt, kann sowohl mittels linearer Elastizitätslehre, als auch durch die verschiedenen Modelle, die die Gitterstruktur mit einbeziehen⁸⁴ ⁸⁵ in guter Übereinstimmung berechnet werden. Unter dem Ansatz, daß die Energiezunahme dW_{SU} bei Verzerrung eines Volumenelementes um

⁸³ Diese Definition ist nur größenordnungsmäßig zu benutzen.

⁸⁴ beispielsweise

- das Peierls-Nabarro Modell in Peierls, R.E., Proc. Phys. Soc., 52:23 (1940) und Nabarro, F.R.N., Proc. Phys. Soc., 59:256 (1947),
- dessen Erweiterung durch Foreman et al in Foreman, A.J., Jaswon, M.A., Wood, J.K., Proc. Phys. Soc., 64A:156 (1951),
- das dreidimensionale Modell von Maradudin in Maradudin, A., J. Phys. Chem. Solids, 9: 1 (1959)
- oder das Frenkel-Kontorova Modell in Frenkel, J., Kontorova T., Phys. Z. Sowj., 13: 1(1938).

⁸⁵ Merkmale dieser Theorien werden zusammengefaßt in Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968, Kap.8.

$d\epsilon_{\mu\nu}$ unter Anlegen einer äußeren mechanischen Spannung $\sigma_{\mu\nu}$ gegeben ist durch :

$$(22) \quad dW = \sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \cdot d\epsilon_{\mu\nu}$$

erhält man für eine Schraubenversetzung :⁸⁶

$$(23) \quad W_{SV} = (\mu \cdot |\vec{b}|^2 / 4\pi) \cdot \ln(\delta/\zeta) \text{ pro Einheitslänge}$$

wobei δ als die Entfernung genommen werden sollte, bei der das Versetzungsfeld der zu berechnenden Versetzung vergleichbar mit dem Versetzungsfeld der Nachbar-Versetzung wird, also $\delta =$ mittlerer Abstand zwischen Versetzungen.

Für Stufenversetzungen gilt analog :

$$(24) \quad W_{SV} = (1-\chi)^{-1} \cdot (\mu \cdot |\vec{b}|^2 / 4\pi) \cdot \ln(\delta/\zeta) \text{ pro Einheitslänge}$$

Hieraus lassen sich unmittelbar folgende Erkenntnisse gewinnen :

- Die Abhängigkeit vom Quadrat des Burgers-Vektors erklärt, weshalb hauptsächlich Versetzungen mit niedrig indizierten Burgers-Vektoren beobachtet werden.
- Gebogene Versetzungen haben im isotropen Gitter schon wegen ihrer vergrößerten Länge die Tendenz, sich geradezubiegen.⁸⁷

5.2.2.3 Die Selbstenergie des Kernes

Der Anteil W_{SK} ist in den meisten Fällen viel kleiner als W_{SV} ⁸⁸. Da außerdem die Berechnung sehr schwierig ist und die Modelle widersprüchlich sind, wird dieser Anteil bei den meisten Berechnungen

⁸⁶ Ableitung z.B. in Nicolas, A., Poirier, J.P., Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, John Wiley 1976, S. 85 ff.

⁸⁷ Eine Abschätzung der Ausrichtungskraft findet sich in Nicolas, A., Poirier, J.P., Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, John Wiley 1976, S.88 ff.

⁸⁸ siehe Weißmantel, C.H., Hamann, C., Grundlagen der Festkörperphysik, Springer, Berlin, Heidelberg, NewYork 1979, S.204

⁸⁹ siehe Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968, S.210 f.

vernachlässigt. Hier soll nur das Ergebnis des Peierls-Modelles angegeben werden :⁸⁹

$$(25) \quad W_{SK} = \mu \cdot |\vec{b}|^2 / [4\pi(1-\chi)] \text{ für Stufenversetzungen,}$$

$$(26) \quad W_{SK} = \mu \cdot |\vec{b}|^2 / 4\pi \quad \text{für Schraubenversetzungen.}$$

5.3 VERSETZUNGSDYNAMIK IM KRISTALLGITTER

5.3.1 Gleitebenen

Die Ebene, in der sich eine - zunächst als gerade angenommene - Versetzung bewegen kann, heißt Gleitebene. Sie ist folgendermaßen bestimmt :

- Bei einer reinen Stufenversetzung⁹⁰ ist die Normale der Gleitebene gegeben durch :

$$(27) \quad \vec{n} = \vec{b} \times \vec{\xi}$$

m.a.W. \vec{b} und $\vec{\xi}$ müssen in der Gleitebene liegen; ein Verlassen ohne Dissoziation ist nicht möglich.

- Bei einer reinen Schraubenversetzung⁹¹ ist die Gleitebene nicht eindeutig bestimmt; jede Ebene, für die \vec{b} eine Zonenachse ist, kann eine Gleitebene sein; m.a.W.: \vec{b} muß in der Gleitebene liegen.

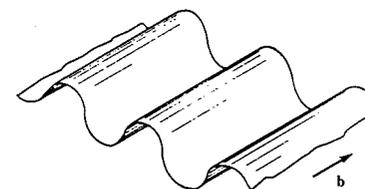


Abbildung 49. Darstellung einer Gleitebene für eine gebogene Stufenversetzung

⁹⁰ siehe Abbildung 50 auf Seite 73 und Abbildung 51 auf Seite 74

⁹¹ siehe Abbildung 52 auf Seite 75 und Abbildung 53 auf Seite 75

⁹² Quelle : Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968, S.26

- Auch gebogene Stufenversetzungen haben Gleitebenen, wie Abbildung 49 zeigt.⁹²
- Unter bestimmten Spannungsverhältnissen sind weitere kompliziertere Bewegungen möglich, auf die hier nicht weiter eingegangen werden soll.⁹³

5.3.2 Versetzungsbewegung durch Anlegen einer äußeren mechanischen Spannung

Nachdem im vorigen Kapitel die prinzipiell möglichen Bewegungsebenen aufgeführt wurden, soll nun dargestellt werden, wie eine von außen angelegte mechanische Spannung eine Versetzungsbewegung erzwingt. Eine mechanische Spannung wirkt auf die Konfiguration der Atome⁹⁴ in der Weise, wie es die nachfolgenden vier Abbildungen für einen übersichtlichen Fall zeigen :

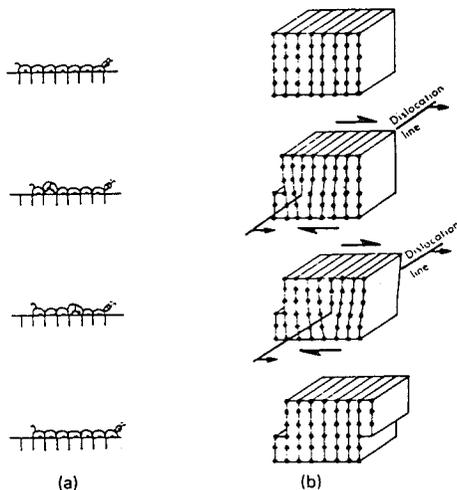


Abbildung 50. Gleitbewegung einer Stufenversetzung: a) Fortbewegung einer Raupe b) Gleiten im kubischen Gitter

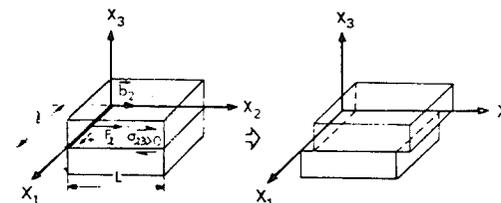


Abbildung 51. Gleitbewegung einer Stufenversetzung unter einer äußeren mechanischen Spannung

Zunächst zur Stufenversetzung, gemäß Abbildung 50 auf Seite 73 und Abbildung 51. Die Versetzungsrichtung $\vec{\xi}$ verlaufe entlang der positiven \vec{X}_1 -Achse, die eingeschobene Halbebene sei die $\vec{X}_1\vec{X}_3$ -Halbebene mit $\vec{X}_3 > 0$. Im Sinne der \overline{SF}/RH Konvention weist der lokale Burgers-Vektor \vec{b} in Richtung der positiven \vec{X}_2 -Achse und die Gleitebene ist die $\vec{X}_1\vec{X}_2$ -Ebene. Die eingezeichnete Kraft auf die Versetzung resultiert aus der eingezeichneten angelegten Scherspannung σ .

Bei der Schraubenversetzung - siehe Abbildung 52 auf Seite 75 und Abbildung 53 auf Seite 75 - ist $\vec{\xi} \parallel \vec{b} \parallel \vec{X}_1$. Die Gleitebene ist damit noch nicht vordefiniert; erst das Anlegen der Scherspannung in der $\vec{X}_1\vec{X}_2$ -Ebene macht diese zur Gleitebene.

In beiden Fällen wirkt die Kraft senkrecht auf die Versetzung. Da keine Annahmen über bevorzugte Gleitebenen gemacht wurden, erfolgt die Bewegung wie eingezeichnet.⁹⁵

⁹³ Siehe Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968, S.26 oder Weißmantel, C.H., Hamann, C., Grundlagen der Festkörperphysik, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1979, S.194

⁹⁴ dies ist stets gemeint, wenn im folgenden von der Kraft "auf die Versetzung" die Rede ist

⁹⁵ Die durch ein allgemeines Spannungsfeld $\sigma_{\mu\nu}$ auf eine Versetzung ausgeübte Kraft wird berechnet in Friedel, J., Dislocations, Pergamon, London 1964

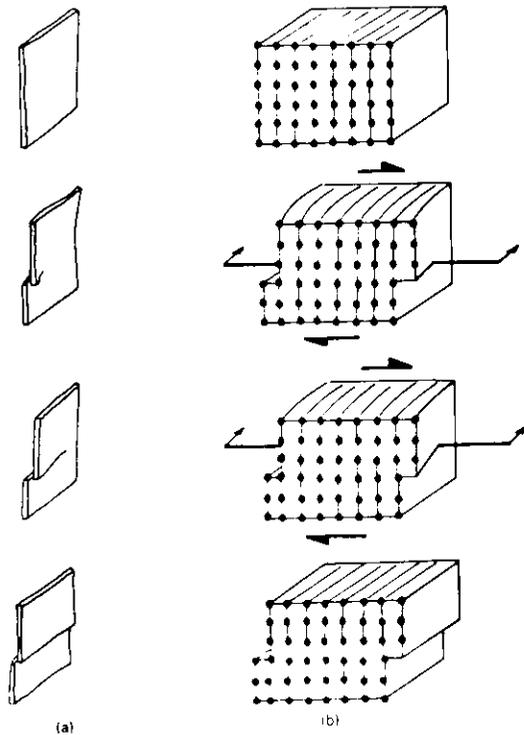


Abbildung 52. Gleitbewegung einer Schraubenversetzung: a) Zerreißen eines Blattes Papier b) Gleiten im kubischen Gitter

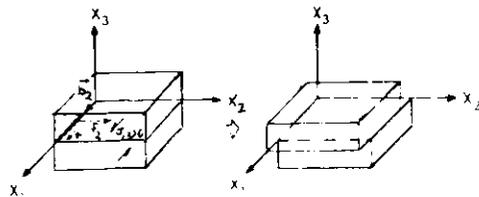


Abbildung 53. Gleitbewegung einer Schraubenversetzung unter einer äußeren mechanischen Spannung

5.3.3 Gleiten im Gitter: Darstellung des Konzeptes der Peierls-Barriere

Nimmt man nun an, daß auch eine geeignete Gleitebene passend liegt, so erhebt sich die nächste Frage nach etwaigen Energiebarrieren, die ein Gleiten ver- oder zumindest behindern können. Zwei Ursachen sollen dafür genannt werden :

Wechselwirkung mit anderen Defekten : Punktdefekte, Fehlstellen, andere Versetzungen und Korngrenzen sind beispielsweise Hindernisse, die die sich bewegenden Versetzungen stoppen können, bis die angelegte Spannung auch diese Barriere überwindet.

Peierls-Barriere : Auch das perfekte Gitter, so postulieren es alle Gittertheorien, übt eine permanente Reibungskraft auf eine sich bewegende Versetzung aus. Diese Kraft bezeichnet man als Peierls-Kraft. Sie hat ihre physikalische Ursache darin, daß während der Versetzungsbewegung permanent Bindungen zwischen den Atomen gebrochen werden müssen, um eine Gitterdistanz weiterzukommen.

Ist dieser Potentialwall einmal überwunden, "fällt" die Versetzung in das nächste Potentialtal. Im einfachsten Fall wäre das also ein Potential der Form :

$$(28) \quad W(\alpha) = W_0 + W_p \sin^2 2\pi\alpha \quad \text{mit } \alpha = x/b \text{ oder } x/2b$$

Die Amplitude dieses Gitterpotentials, genannt Peierls-Barriere, muß überwunden werden, damit die Versetzung gleiten kann. Die Peierls-Barriere ist als grobe phänomenologische Größe zu verstehen und wird abgeschätzt⁹⁶ zu :

$$(29) \quad \sigma_p \approx 10^{-2}\mu \quad \text{bei kovalenter Bindung}$$

bis

$$(30) \quad \sigma_p \approx 10^{-4}\mu \quad \text{bei metallischer Bindung⁹⁷}$$

⁹⁶ siehe Kosevich, A.M., Crystal dislocations and the theory of Elasticity, in Band 1 von Nabarro, F.R.N., (Hrsg.), Dislocations in Solids, North Holland Publishing Company, 1979/80

⁹⁷ Verständlicherweise ist die Peierls-Barriere bei starker kovalenter Bindung höher als bei Metallen, wo die Leitungselektronen das "Springen" der atomaren Bindungen erleichtern

5.3.4 Weitere Hinweise zu Bewegungsmöglichkeiten von Versetzungen

Die bisher eingeführten Gleitbewegungen samt den zugehörigen Barrieren und Vorzugsrichtungen sollen nicht verdecken, daß es eine Anzahl weiterer Bewegungsmöglichkeiten gibt. So ist z.B. manchmal das Aufspalten einer Versetzung selbst dann noch möglich, wenn ihr Burgers-Vektor ein primitiver Basisvektor ist. Eine Aufspaltung in zwei Hälften mit einem dazwischenliegenden Stapelfehler ist nicht nur möglich, sondern manchmal energetisch sogar günstiger.

Zudem kann die Struktur des Versetzungskernes, insbesondere bei komplizierteren anisotropen Kristallen, zu weiteren Bewegungsarten führen (Kink- und Jog-Bewegungen, pencil glide z.B.). Auch Klettern von Versetzungen ist möglich. Für all diese Bewegungsabläufe möchte ich auf das Buch Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968 und die fünf Bände von Nabarro, F.R.N., (Hrsg.), Dislocations in Solids, North Holland Publishing Company, 1979/80 hinweisen.

6.0 VERSETZUNGEN IN α -QUARZ

6.1 VORBEMERKUNG ZU BISHERIGEN UNTERSUCHUNGEN

Ziel der meisten Veröffentlichungen über Versetzungen in α -Quarz ist eine Erklärung des elastischen Verhaltens von natürlichem und synthetischen Quarz; beobachtet wurde das Scher- und Kompressionsverhalten unter Anwendung äußerer Drücke bei verschiedenen Temperaturen und daraus wurden in Verbindung mit Versetzungs-Charakterisierungen erklärende Modelle des elastischen Verhaltens abgeleitet.

Eine Übertragung der dabei gewonnenen Ergebnisse auf unsere Experimente ist aus folgenden Gründen problematisch :

1. Unterschiede in den Spannungsfeldern. Was auf der einen Seite beispielsweise durch hydraulische Pressen erreicht wurde, erzielen wir durch piezoelektrische Effekte. Die Unterschiede werden offenbar :
 - Externe elektrische Felder vorhanden / nicht vorhanden,
 - Zeitskala Nanosekunden / Zeitskala Bruchteile von Sekunden bis Minuten,
 - periodische / nichtperiodische Vorgänge,
 - Probe im Synchrotron-Strahl / unbestrahlt,
 - unterschiedliche Kopplung der verschiedenen Spannungskomponenten.
2. Unsicherheiten bisheriger Näherungsmethoden. Die hauptsächlichsten Fragen sind :
 - a. Welches sind die in Frage kommenden Gleitebenen ?
 - b. Welches sind die dabei zu überwindenden Energiebarrieren ?
 - c. Wie hoch sind die Versetzungsgeschwindigkeiten ?

Nach den Erfahrungen mit Versetzungsbewegungen in fcc-, bcc- und hcp-Metallen erscheint es auch für α -Quarz notwendig,⁹⁸ zur Klärung dieser Fragen nicht nur die Anisotropie der elastischen Konstanten

⁹⁸ siehe Blacic, J.D., Tectonophysics, 27, S. 271 - 294 (1975).

beim Aufbau einer Theorie zu beachten, sondern die geometrischen Randbedingungen der Probe ebenso mit einzubeziehen wie die Einflüsse des Versetzungskernes. Das ist für α -Quarz⁹⁹ bis heute noch nicht erarbeitet worden. Außerdem ist noch der Bereich nahezu unbearbeitet, der Fragen der Dissoziation von Versetzungen unter äußeren Spannungen inclusive der dabei auftretenden Energien von Stapelfehlern im anisotropen Gitter betrifft.

Unter all diesen Gesichtspunkten erscheint eine Übertragbarkeit der bisherigen Theorien nur sehr eingeschränkt gegeben zu sein.

6.2 GLEITEBENEN-SYSTEME IN α -QUARZ

Unter Beachtung der Vorbemerkungen möchte ich nun die bisher bekannten Gleitebenen-Systeme beschreiben. Dabei werde ich auch Gleitebenen-Systeme aufzählen, die bisher nur unter erhöhten Temperaturen oder nur sehr selten beobachtet wurden, da auch diese in Anbetracht der vielen in "Vorbemerkung zu bisherigen Untersuchungen" auf Seite 78 genannten Unterschiedlichkeiten eventuell auftreten könnten. In α -Quarz gibt es folgende Gleitebenen-Systeme:¹⁰⁰

Gleitebenen-System	Gleitebene	Gleitrichtung	Abbildungsbeispiel
a basal	(0001)	[-1-120]	Abbildung 54 auf Seite 81
	(0001)	[-12-10]	-
	(0001)	[2-1-10]	-
a prismatisch	(01-10)	[2-1-10]	Abbildung 55 auf Seite 81
	(10-10)	[-12-10]	-
	(1-100)	[-1-120]	-

Tabelle 5. Gleitebenen in α -Quarz (Teil 1 von 2)

Gleitebenen-System	Gleitebene	Gleitrichtung	Abbildungsbeispiel
a pyramidal1	(01-11)	[2-1-10]	Abbildung 56 auf Seite 81
	(10-11)	[-12-10]	-
	(1-101)	[-1-120]	-
a pyramidal2	(01-1-1)	[2-1-10]	Abbildung 57 auf Seite 82
	(10-1-1)	[-12-10]	-
	(1-10-1)	[-1-120]	-
c prismatisch1	(01-10)	[0001]	Abbildung 58 auf Seite 82
	(10-10)	[0001]	-
	(1-100)	[0001]	-
c prismatisch2	(2-1-10)	[0001]	Abbildung 59 auf Seite 82
	(-12-10)	[0001]	-
	(-1-120)	[0001]	-
a-c prismatisch1	(01-10)	[2-1-13]	Abbildung 60 auf Seite 83
	(10-10)	[1-213]	-
	(1-100)	[11-23]	-
a-c prismatisch2	(01-10)	[2-1-1-3]	-
	(10-10)	[1-21-3]	-
	(1-100)	[11-2-3]	-
a-c pyramidal1	(0-111)	[11-23]	Abbildung 61 auf Seite 83
	(10-11)	[-2113]	-
	(-1101)	[1-213]	-
a-c pyramidal2	(0-11-1)	[11-2-3]	-
	(10-1-1)	[-211-3]	-
	(-110-1)	[1-21-3]	-

Tabelle 5. Gleitebenen in α -Quarz (Teil 2 von 2)

⁹⁹ für β -Quarz siehe Baëta, R.D., Ashbee, K.H.G., Am. Mineral., 54: 1551 ff. 1574 ff. (1969).

¹⁰⁰ Die Tabelle enthält eine Aufschlüsselung der in Trepied, L., Journ. d. phys. Lettr. 39, L433 (1978) genannten Gleitebenen-Systeme



Abbildung 54. Gleitebenen-System \bar{a} -basal.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer (0001) -Gleitebene mit einer $[\bar{1}120]$ Gleitrichtung gewählt.

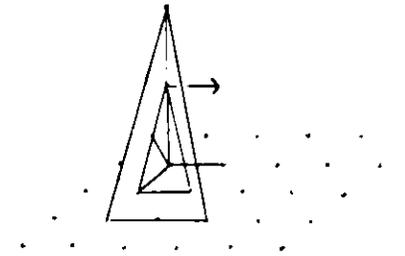


Abbildung 57. Gleitebenen-System \bar{a} -pyramidal2.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(01\bar{1})$ -Gleitebene mit einer $[2\bar{1}10]$ Gleitrichtung gewählt.

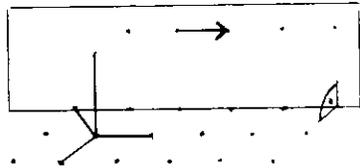


Abbildung 55. Gleitebenen-System \bar{a} -prismatisch.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(01\bar{1}0)$ -Gleitebene mit einer $[2\bar{1}10]$ Gleitrichtung gewählt.

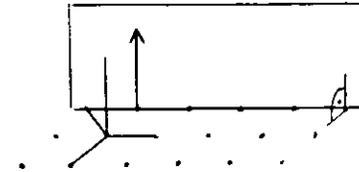


Abbildung 58. Gleitebenen-System \bar{c} -prismatisch1.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(01\bar{1}0)$ -Gleitebene mit einer $[0001]$ Gleitrichtung gewählt.

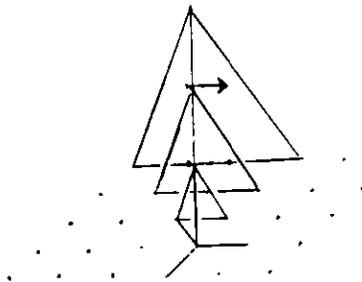


Abbildung 56. Gleitebenen-System \bar{a} -pyramidal1.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(01\bar{1}1)$ -Gleitebene mit einer $[2\bar{1}10]$ Gleitrichtung gewählt.

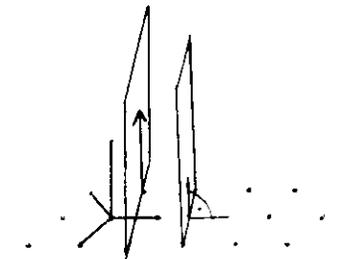


Abbildung 59. Gleitebenen-System \bar{c} -prismatisch2.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(2\bar{1}10)$ -Gleitebene mit einer $[0001]$ Gleitrichtung gewählt.

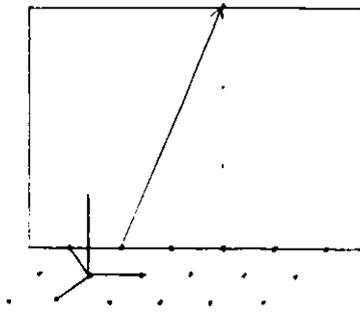


Abbildung 60. Gleitebenen-System $\bar{a}+\bar{c}$ -prismatisch.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(0\bar{1}\bar{1}0)$ -Gleitebene mit einer $[2\bar{1}\bar{1}3]$ Gleitrichtung gewählt.

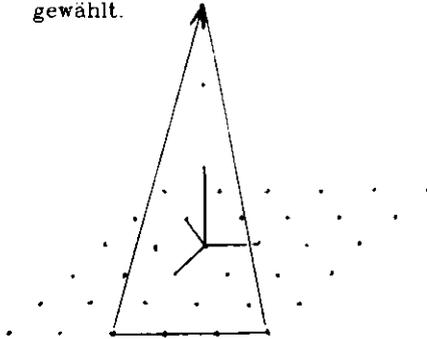


Abbildung 61. Gleitebenen-System $\bar{a}+\bar{c}$ -pyramidal.: Für dieses Gleitebenen-System wurde hier das Beispiel einer $(0\bar{1}\bar{1}1)$ -Gleitebene mit einer $[1\bar{1}\bar{2}3]$ Gleitrichtung gewählt.

ERGEBNISSE DER EXPERIMENTE

Die ersten Experimente der stroboskopischen Röntgentopographie betrafen die folgenden zwei physikalischen Themen :

- Darstellung resonanter akustischer Schwingungsmoden,
- Beobachtung von Versetzungsschwingungen.

Im folgenden Abschnitt sollen die gewonnenen Ergebnisse dargestellt und diskutiert werden. Das erste Kapitel beinhaltet eine Charakterisierung der ausgewerteten Reflexe, u.a. in Bezug auf Braggwinkel, Wellenlängen und Formfaktoren, also auf Werte, die für die nachfolgende Interpretation benötigt werden.

Das zweite Kapitel zeigt die Ergebnisse der Abbildung von Schwingungsmoden und stellt die Möglichkeiten der stroboskopischen Röntgentopographie dem mit phasenintegrierter Röntgentopographie Erreichbaren gegenüber.

Im dritten Kapitel schließlich geht es um die Darstellung und Interpretation der Versetzungskontraste. Zunächst erfolgt eine Bestimmung der räumlichen Lage von drei ausgewählten Versetzungen durch Auswertung ihrer kinematischen Kontraste in Projektions- und Sektionstopogrammen. Die in Analogie hierzu durchgeführte Auswertung der Versetzungskontraste im schwingenden Quarz führt zu physikalisch nicht zu erwartenden Ergebnissen, deren Überprüfung und Modifizierung nachfolgend diskutiert und dargestellt werden.

7.0 CHARAKTERISIERUNG AUSGEWERTETER REFLEXE

Wie bereits in "Versetzungskontraste" auf Seite 29 erwähnt wurde, beinhalten die verschiedenen Reflexe einer Laue-Aufnahme alle Informationen über die räumliche Lage der Versetzungen im Kristall. Im folgenden sollen die Beziehungen abgeleitet werden, die es ermöglichen, aus den zweidimensionalen Aufnahmen die Koordinaten in allen drei Dimensionen zu errechnen.

Es wird sich zeigen, daß allein aus einem Reflex die zwei Kristall-Koordinaten x , z' parallel zum Röntgenfilm aller in diesem Reflex sichtbaren Versetzungen berechnet werden können. Die Berechnung von y' erfolgt entweder

- unter Zuhilfenahme des zugeordneten Stereo-Reflexes¹⁰¹ oder
- unter Zuhilfenahme eines Sektionstopogrammes.

Im folgenden soll der zweite Weg beschritten werden, wobei zur Überprüfung stets zwei Reflexe unabhängig voneinander ausgewertet wurden (die darüberhinaus außerdem auch ein Stereopaar bilden).

7.1 BRAGGWINKEL

Begonnen werden soll mit der Bestimmung der Bragg-Winkel der ausgewerteten Reflexe.

7.1.1 Definition der Braggwinkel-Komponenten

Zur Berechnung ist es hilfreich, den Bragg-Winkel θ in eine Horizontal-Komponente θ_H und eine Vertikal-Komponente θ_V aufzuspalten.

Die Koordinaten seien in diesem Abschnitt auf den Durchstoßungspunkt des direkten Strahles durch die Filmebene bezogen.

¹⁰¹ Siehe z.B. Tuomi, T., Naukkarinen, K., Rabe, P., Phys. Stat. Sol.(a) 25, 93 (1974)

Vorzeichen der benutzten Winkel

- Winkel in der Filmebene werden in Strahlrichtung y' im Uhrzeigersinn positiv gemessen. Wenn kein anderer Bezug gegeben ist, so wird der Winkel ausgehend von der positiven Halbachse f_1 gemessen.
- Für die Horizontalkomponente θ_h gilt: Bei Reflexen, die in Richtung der positiven Halbachse f_1 liegen, sei θ_h positiv.
- Für die Vertikalkomponente θ_v gilt: Bei Reflexen, die in Richtung der positiven Halbachse f_3 liegen, sei θ_v positiv.
- Bei θ wird nur der Betrag benutzt.

Damit ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\tan 2\theta = \sqrt{(b^{-1})^2 + (b^{-3})^2} / b_y$$

$$\tan 2\theta_v = b^{-3} / b_y \quad \text{und} \quad \tan 2\theta_h = b^{-1} / b_y$$

Damit folgt

$$(1) \quad \tan^2 2\theta = \tan^2 2\theta_v + \tan^2 2\theta_h$$

Der weitere eingezeichnete Winkel σ ist hilfreich zur Umformung. Es gilt

$$\tan \sigma = -b^{-3} / b^{-1} \quad \text{falls } b^{-1} > 0$$

$$\tan(\sigma - 180^\circ) = -b^{-3} / b^{-1} \quad \text{falls } b^{-1} < 0$$

(siehe auch Abbildung 63 auf Seite 88) und damit

$$(2a) \quad \tan \sigma = -\tan 2\theta_v / \tan 2\theta_h \quad \text{falls } \theta_h > 0$$

$$(2b) \quad \tan(\sigma - 180^\circ) = -\tan 2\theta_v / \tan 2\theta_h \quad \text{falls } \theta_h < 0$$

$$(3) \quad \tan 2\theta_v = -\tan 2\theta \cdot \sin \sigma$$

$$(4) \quad \tan 2\theta_h = \tan 2\theta \cdot \cos \sigma$$

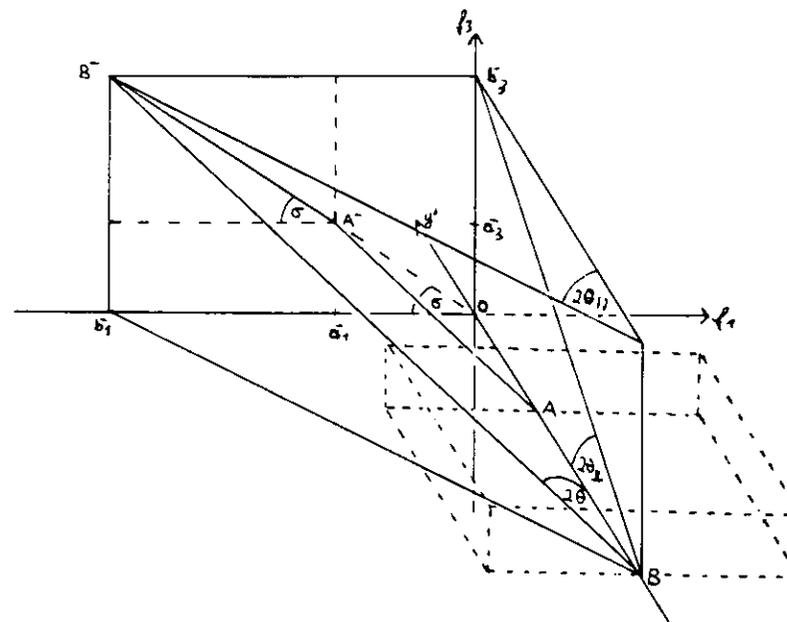


Abbildung 62. Darstellung der Bragg-Winkel Komponenten: Die Punkte A und B auf der Rück- bzw. Vorderseite des Kristalles werden unter einem Bragg-Winkel θ auf die Punkte A' und B' in der durch f_1 und f_3 aufgespannten Filmebene abgebildet. Die Strahlrichtung des einfallenden Strahls verläuft entlang der y' -Achse.

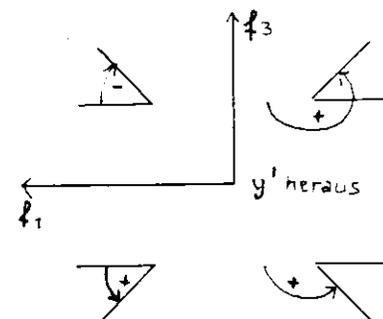


Abbildung 63. Darstellung der σ -Winkel

7.1.2 Berechnung der θ -Winkel aus den Topogrammen

7.1.2.1 Bragg-Winkelbestimmung bei konstanter Kristalldicke

Sind A und B wie in Abbildung 62 auf Seite 88 Punkte auf der Rück- bzw. Vorderseite¹⁰² und liegen sie am horizontalen Ende des durch einen Spalt ausgeblendeten Strahles, so entspricht die Strecke A⁻B⁻ der Kante eines Sektionstopogrammes.

Damit ergibt sich die einfache Berechnung des Bragg-Winkels und seiner Komponenten :

$$(5) \quad \tan 2\theta = A^{\cdot}B^{\cdot} / t$$

mit t = Dicke des Kristalles¹⁰³, sowie

$$(6a) \quad \tan \sigma = -(b_3^- - a_3^-) / (b_1^- - a_1^-) \quad \text{falls } (b_1^- - a_1^-) > 0$$

$$(6b) \quad \tan (\sigma - 180^\circ) = -(b_3^- - a_3^-) / (b_1^- - a_1^-) \quad \text{falls } (b_1^- - a_1^-) < 0$$

woraus mit (3) und (4) die Komponenten errechenbar sind.

7.1.2.2 Braggwinkelbestimmung bei variierender Kristalldicke

Gegenüber den bisher hergeleiteten Formeln ergibt sich eine weitere Verkomplizierung, da der Quarz nicht eine planparallele Scheibe, sondern von bikonvexer Form ist. Aus diesem Grunde muß die Variation der Dicke im Bereich der Versetzungen bekannt sein.

Bestimmung der Quarzdicken Ausgangspunkt ist die Dicke in der Mitte der Quarzlinse. Diese berechnet sich¹⁰⁴ aus :

$$t_0 = 1.911 \text{ mm/MHz} \cdot \nu_{\text{Res}}$$

Die übrigen Dicken ergeben sich aus der Geometrie des Sektionstopogrammes. Es gilt nach Abbildung 62 auf Seite 88 :

$$(7) \quad \tan 2\theta_1 = (b_3^- - a_3^-) / \overline{AB} = h / t$$

mit h = vertikale Höhe des Sektionstopogrammes und
und t = Dicke des Kristalles

Werden nun sowohl h als auch t abhängig von ihrem Abstand vom Zentrum des Quarzes, so soll diese Position im folgenden durch untere Indizes abgegeben werden. Für einen Reflex ist θ_1 konstant und somit gilt :

$$(8) \quad t_1 = (h_1/h_0) \cdot t_0$$

Nach den Topogrammen von Abbildung 64 auf Seite 91 bis Abbildung 67 auf Seite 92 ergeben sich die Werte von Tab. 6.

		Mitte	V1	V2	V3	linker Rand d. Sekt. Top.
1-2-2	h [Skt]	33	29.6	29.5	30.1	23
1-2-2	t [mm]	1.99	1.78	1.78	1.81	1.38
-1-1-2	h [Skt]	32	28.1	28.0	28.5	21
-1-1-2	t [mm]	1.99	1.75	1.74	1.77	1.30
Mittelwert	t [mm]	1.99	1.765	1.76	1.79	1.34
Abst. v. Zentr.	s [mm]	0	3.032	3.04	2.88	5.34

Tabelle 6. Quarzdicke an verschiedenen Punkten

Aus diesen Ergebnissen folgt, daß der Quarz nicht mit einem konstanten Krümmungsradius geschliffen wurde. Der Krümmungsradius, errechenbar aus

$$(9) \quad r_1 = \left(s^2 + \frac{1}{2} (t_0 - t_1)^2 \right) / (t_0 - t_1)$$

liegt im Versetzungsbereich bei r = 40.5 mm und nimmt zum linken Rand des Sektionstopogrammes bis auf 44 mm zu.

¹⁰² Vorderseite und Rückseite werden stets in Bezug auf die Strahlquelle gesehen

¹⁰³ vorausgesetzt, der Kristall steht senkrecht zum einfallenden Strahl

¹⁰⁴ nach Angabe des Herstellers

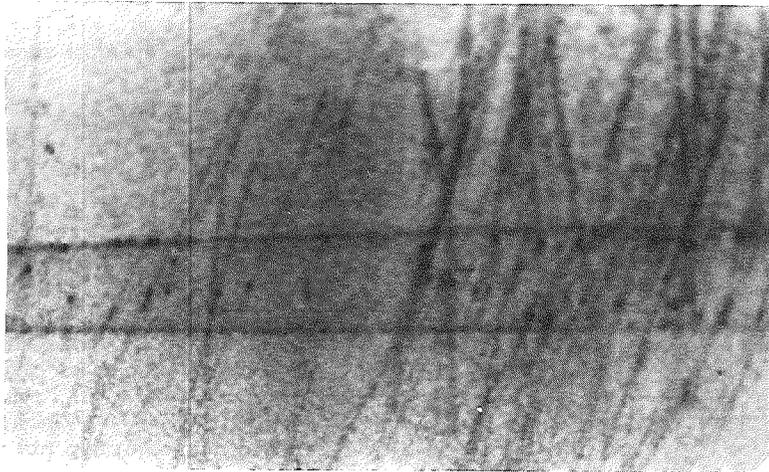


Abbildung 64. $1\bar{2}$ -2-Projektionstopogramm mit eingebettetem Sektions - Topogramm: Die Einbettung ermöglicht eine eindeutige Zuordnung zwischen Versetzung und Punkt im Sektions - Topogramm

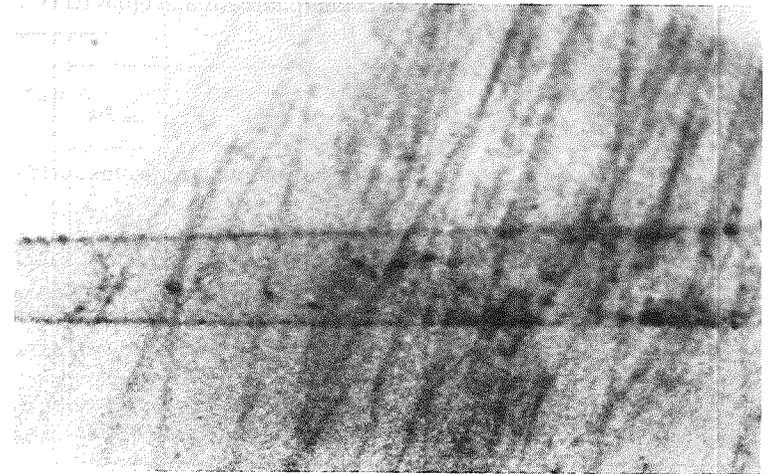


Abbildung 66. $1\bar{1}$ -2-Projektionstopogramm mit eingebettetem Sektions - Topogramm

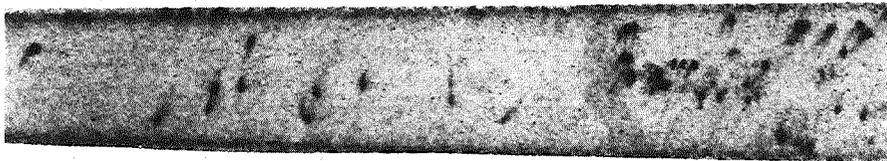


Abbildung 65. $1\bar{2}$ -2-Sektionstopogramm: Das alleinstehende Sektions - Topogramm hat den höheren Kontrast

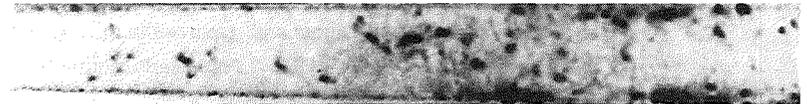


Abbildung 67. $1\bar{1}$ -2-Sektionstopogramm

7.1.2.3 Berechnung der Winkel zweier Reflexe

Ruheposition Aus Formel (7) ergibt sich die Vertikalkomponente des Bragg-Winkels θ_{\perp} , aus dem Sektionstopogramm gemäß Abbildung 62 auf Seite 88 und Abbildung 63 auf Seite 88 der Winkel σ und aus den Formeln (3) und (4) der Bragg-Winkel θ nebst seiner Horizontalkomponente θ_{\parallel} :

	θ	θ_{\perp}	θ_{\parallel}	σ	$\tan 2\theta$	$\tan 2\theta_{\perp}$	$\tan 2\theta_{\parallel}$
1-2-2	8.0°	7.4°	-6.4°	247°	0.287	0.264	-0.227
-1-1-2	7.5°	7.2°	4.3°	-73°	0.270	0.257	0.151

Tabelle 7. Braggwinkel der Ruheposition

Schwingender Quarz Die Aufnahmen des schwingenden Quarzes wurden in einer etwas veränderten Stellung aufgenommen. Für die Vertikalkomponente gilt

$$\tan 2\theta_{\perp} = h_l / t_l$$

und mit den folgenden Daten

Reflex	V1 [Skt]	V2 [Skt]	V3 [Skt]
1-2-2	26.2	26.1	26.7
-1-1-2	24.0	23.9	24.5

Tabelle 8. Sektionstopogramm-Vermessung des schwingenden Quarzes

ergeben sich wie oben die Winkel, nun für den schwingenden Quarz:

	θ	θ_{\perp}	θ_{\parallel}	σ	$\tan 2\theta$	$\tan 2\theta_{\perp}$	$\tan 2\theta_{\parallel}$
1-2-2	7.25°	6.6°	-3°	246°	0.259	0.236	-0.105
-1-1-2	6.6°	6.1°	2.5°	-68°	0.234	0.216	0.087

Tabelle 9. Braggwinkel des schwingenden Quarzes

7.2 ZUSAMMENSTELLUNG WICHTIGER PHYSIKALISCHER GRÖSSEN

Bei der Auswertung der Topogramme ist die Kenntnis einer Reihe physikalischer Größen wichtig. Die meisten dieser Größen wurden bereits in verschiedenen vorangegangenen Kapiteln eingeführt. Hier sollen sie noch einmal in der Übersicht zusammengestellt und für die zwei hauptsächlich ausgewerteten Reflexe auch ausgerechnet werden.¹⁰⁵

Zur Berechnung wurde das interaktive Programm FORMFAKT geschrieben, daß im Anhang unter "Programm FORMFAKT" auf Seite 152 zu finden ist. Es handelt sich um folgende Größen:

- Strukturfaktor¹⁰⁶:

$$F(h,k,l) = \sum_n f_n \exp(2\pi i (hu_n + kv_n + lw_n))$$

- Streuanteil der dielektrischen Suszeptibilität¹⁰⁷:

$$\chi_{r\mathbf{g}} = C_1 \cdot (r_e \lambda^2 / \pi V_c) \cdot F_{\mathbf{g}}'$$

- Absorptionsanteil der dielektrischen Suszeptibilität¹⁰⁸:

$$\chi_{i\mathbf{g}} = \Gamma F_{\mathbf{g}}''$$

¹⁰⁵ Unter Vernachlässigung der Dispersionskorrektur Δf

¹⁰⁶ siehe "Kinematische Theorie" auf Seite 14 Formel (3)

¹⁰⁷ siehe "Komplexe physikalische Größen" auf Seite 16 Formel (7)

¹⁰⁸ siehe "Komplexe physikalische Größen" auf Seite 16 Formel (8)

- dielektrische Suszeptibilität¹⁰⁹ :

$$\chi_{\mathbf{g}} = \chi_{r\mathbf{g}} + i \cdot \chi_{i\mathbf{g}}$$

- dielektrische Suszeptibilität des $\overline{hk\bar{l}}$ -Reflexes¹¹⁰ :

$$\chi_{\overline{hk\bar{l}}} = \chi_{r\overline{hk\bar{l}}} + i \cdot \chi_{i\overline{hk\bar{l}}}$$

- dielektrische Suszeptibilität in 000-Richtung :

$$\chi_0 = \Gamma \cdot (F_0' + iF_0'')$$

mit $F_0' = \text{Anz. d. Elektronen pro Einheitszelle} = 90$

$$\text{und } F_0'' = \lambda / (2\pi V_c) \frac{1}{f} \left[n_{\text{Si}} \left(\tau_{\text{Dip}} + \tau_{\text{Qua}} \right)_{\text{Si}} + n_{\text{O}} \left(\tau_{\text{Dip}} + \tau_{\text{Qua}} \right)_{\text{O}} \right]$$

mit $n_{\text{Si}} = 3 = \text{Anzahl der Silizium Atome pro Einheitszelle}$

und $n_{\text{O}} = 6 = \text{Anzahl der Sauerstoff Atome pro Einheitszelle}$

- Extinktionslänge^{111 112} :

$$\Delta_e = \lambda \sqrt{(\gamma_0 \gamma_{\mathbf{g}}')} / \left(C \cdot \sqrt{\chi_{\mathbf{g}} \chi_{\overline{hk\bar{l}}}} \right)$$

- Reflektionsbreite^{111 113} :

$$\Delta\psi = 2 \cdot C \cdot \sqrt{\chi_{\mathbf{g}} \chi_{\overline{hk\bar{l}}}} \cdot \sqrt{(\gamma_{\mathbf{g}} / \gamma_0)} / \sin 2\theta$$

- linearer Absorptionskoeffizient¹¹⁴ :

$$\mu_0 = 2\pi / \lambda \cdot \Gamma \cdot F_0''$$

Reflex unter Braggwinkel θ		1-2 2 8.0°	1-2 2 7.25°	-1-1 2 7.5°	-1-1 2 6.6°
Einfallswinkel		0.0°	0.0°	0.0°	0.0°
Wellenlänge λ	[10 ⁻¹⁰ m]	0.506	0.459	0.475	0.418
Netzebenenabstand d	[10 ⁻¹⁰ m]	1.82	1.82	1.82	1.82
Strukturfaktor F.	Realt.	-16.3	-16.3	-15.6	-15.6
	Imagt.	19.5	19.5	-17.2	17.2
Betragsquadrat d. Strukt.faktors		646	646	540	540
Strukturfaktor in 000-Richtung		90	90	90	90
Streuant. der diel. Susz.	Realt. [10 ⁻⁶]	-0.330	-0.272	-0.279	-0.216
	Imagt. [10 ⁻⁶]	0.397	0.326	-0.308	-0.239
Absorptionsant. d. diel. Susz.	Realt. [10 ⁻⁹]	-0.891	-0.615	-0.698	-0.443
	Imagt. [10 ⁻⁹]	1.190	0.821	-0.907	-0.576
Diel. Susz. d. hkl-Reflexes	Realt. [10 ⁻⁶]	-0.332	-0.272	-0.278	-0.216
	Imagt. [10 ⁻⁶]	0.396	0.326	-0.309	-0.239
Diel. Susz. d. -h-k-l -Refl.	Realt. [10 ⁻⁶]	-0.316	-0.271	-0.280	-0.217
	Imagt. [10 ⁻⁶]	-0.398	-0.327	0.307	0.232
Diel. Susz. in 000-Richtung	Realt. [10 ⁻⁶]	1.83	1.50	1.61	1.25
	Imagt. [10 ⁻⁹]	2.52	1.74	1.97	1.25
Betrag d. diel. Susz.	[10 ⁻⁶]	0.516	0.425	0.415	0.322
Extinktionslänge	[μm]	99.9	109.8	116.2	131.5
Reflektionsbreite	[10 ⁻⁶]	3.53	3.23	3.05	2.71
lin. Absorptionskoeff.	[mm ⁻¹]	0.312	0.237	0.260	0.188

Tabelle 10. Datenzusammenstellung für zwei Reflexe (σ -Polarisation)

¹⁰⁹ siehe "Komplexe physikalische Größen" auf Seite 16 Formel (9)

¹¹⁰ da $\chi_{r\mathbf{g}} = \chi_{r\mathbf{g}}^*$ und $\chi_{i\mathbf{g}} = \chi_{i\mathbf{g}}^*$

¹¹¹ Bei senkrechtem Auftreffen des Röntgenstrahls auf die Vorderseite des Kristalles.

¹¹² siehe "Ausbreitung von Wellenfeldern im schwach deformierten Kristallgitter" auf Seite 25 Formel (21)

¹¹³ siehe ebenda Formel (22)

¹¹⁴ siehe "Komplexe physikalische Größen" auf Seite 16 Formel (10)

8.0 ABBILDUNG VON AKUSTISCHEN SCHWINGUNGEN

Die Anregung eines Quarzes zu resonanten Schwingungen führt zu stehenden Wellen im Kristall, die, abhängig von den durch die Kristallstruktur und -bindung bedingten Elastizitätseigenschaften und den durch Defekte und Oberflächen definierten Randbedingungen, zu Deformationen der Gitterstruktur führen.

Sowohl eine Deformation durch Variation des Gitterabstandes, als auch eine durch Krümmung der Netzebenen, führt gemäß "Ausbreitung von Wellenfeldern im schwach deformierten Kristallgitter" auf Seite 25 zu einer Modulation der Intensität der reflektierten Röntgenstrahlen. Da die Intensitätserhöhung proportional zur zweiten räumlichen Ableitung der Gitterverschiebung ist, ergibt sich im Röntgen-Topogramm ein direktes Abbild einer akustischen stehenden Welle im Kristall.

8.1 PROJEKTIONSTOPOGRAMME

8.1.1 Phasenintegrierte Aufnahmen

Die herkömmliche Röntgentopographietechnik zur Abbildung von Schwingungsmoden in Kristallen bedingte bei Benutzung von Röntgenröhren Belichtungszeiten von mehreren Stunden, so daß alle Schwingungszustände von Nulldurchgang bis Schwingungsmaximum übereinander auf eine Filmposition abgebildet wurden; ich spreche deshalb im folgenden von phasenintegrierten Topogrammen im Gegensatz zu den weiter unten folgenden stroboskopisch aufgenommenen Röntgen-Topogrammen.

¹¹⁵ In der Literatur wird anstelle des Begriffes Projektionstopogramm häufig auch von "traverse pattern" oder "traverse topographs" gesprochen, da man bei dem geringen Strahlquerschnitt herkömmlicher Röntgenröhren ein Gesamtbild eines Kristalles nur durch Translation desselben in Bezug auf die Röhre, also quasi durch eine Aneinanderreihung von Sektionstopogrammen, erzeugen konnte. Diese "Traversierung" entfällt bei der Röntgentopographie mit Synchrotronstrahlung, weshalb der Begriff Projektionstopogramm sinnvoller erscheint.

¹¹⁶ Spencer, W.J. in Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, vol.V 1968, p.111-161.

Die phasenintegrierte Aufnahme von Projektionstopogrammen¹¹⁵ hat sich als gutes Hilfsmittel zur Abbildung von akustischen Schwingungsmoden, vor allem in Quarz erwiesen. Zur Übersicht über bisherige Arbeiten sei auf den Artikel von Spencer (1968)¹¹⁶ verwiesen. Kompliziertere Schwingungsmoden wie flexure und thickness-twist wurden so abgebildet, wie es die Theorie von Mindlin et al. vorhergesagt hatte.¹¹⁷ Besonders geeignet ist dieses Verfahren, um unerwünschte Nebenmoden zu minimieren: Das Schwingungsbild wird beispielsweise in Abhängigkeit von der Elektrodenform beobachtet und gleichzeitig wird das elektrische Verhalten des Oszillators untersucht. Häufig kann elektrisches Fehlverhalten auf mechanische Nebenmoden zurückgeführt werden.¹¹⁸ Vergleiche von röntgentopografischen Aufnahmen mit Intensitätsmessungen durch Röntgendektoren zeigten die theoretisch erwartete Abhängigkeit von der Krümmung der Netzebenen.¹¹⁹

Phasenintegrierte Projektionstopogramme sind mit Synchrotronstrahlung sehr leicht aufzunehmen, da nur eine grobe Vorjustierung des Kristalles erforderlich ist und die Belichtungszeiten nur wenige Sekunden betragen. Das Hauptproblem besteht in der Minimierung des Streuuntergrundes und kann durch Arbeiten in Vakuum (10^{-2} Torr) und Verwendung geeigneter Filter (z.B. Aluminium, Plexiglas) gut gelöst werden.

Abbildung 69 auf Seite 99 bis Abbildung 71 auf Seite 100 zeigen Projektionstopogramme eines rechteckigen AT-Quarzes, einmal in Ruhe ohne äußere Spannung, einmal in der Grund- und einmal in der 3. Oberwelle der thickness-shear-Schwingungsmoden. Kurz neben der Resonanzfrequenz zeigen sich kompliziertere Nebenmoden - hauptsächlich flexure -, die ebenfalls sehr gut aufgelöst werden können, wie Abbildung 72 auf Seite 100 zeigt.

¹¹⁷ siehe z.B. Mindlin, R.D., Spencer W.J., J. Acoust. Soc. Am. vol.42, no.6, S.1268 - 77 (1967)

¹¹⁸ siehe z.B. die Artikel Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys., vol.8, S. 1827-42 (1975) und Goodall, F.N., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys., vol.8, S. 1843-50 (1975).

¹¹⁹ durchgeführt beispielsweise von Spencer, W.J., Hunt, R. M., Journ. of the Acoust. Soc. of America, vol 39 no 5 pt.1 p.929 ff. (1966) und Haruta, K., Journ. of Appl. Physics, vol 38 no.8 p.3312 ff. (1967).

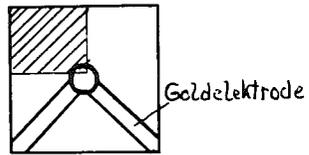


Abbildung 68. Skizze eines rechteckigen AT-Quarzes: Der auf den folgenden Topogrammen abgebildete Ausschnitt ist schraffiert dargestellt.

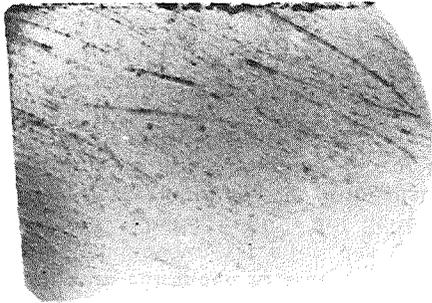


Abbildung 69. Projektionstopogramm eines rechteckigen AT-Quarzes in Ruheposition: Ausschnitt gemäß Abbildung 68.

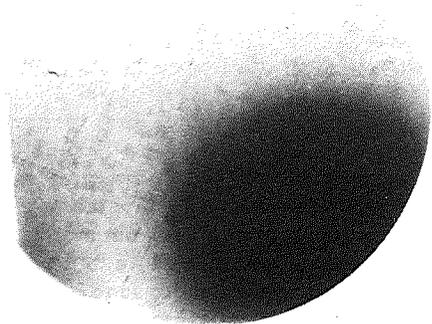


Abbildung 70. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle: Ausschnitt gemäß Abbildung 68, $\nu_{Res} = 5.99$ MHz, $U = 1.8$ V_{pp}.

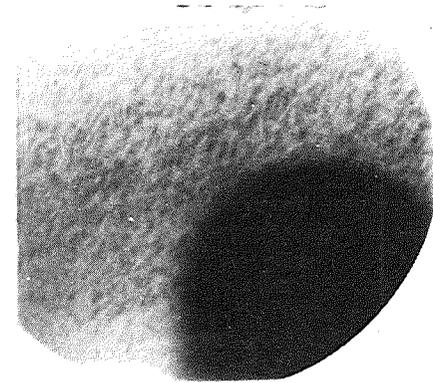


Abbildung 71. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle: Ausschnitt gemäß Abbildung 68 auf Seite 99, $\nu_{Res} = 17.898$ MHz, $U = 36$ V_{pp}.

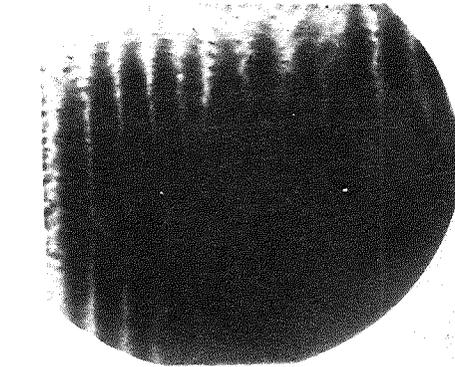


Abbildung 72. Phasenintegriertes Projektionstopogramm der Nebenmoden der thickness-shear - Grundwelle: Ausschnitt gemäß Abbildung 68 auf Seite 99, $\nu = 5.98$ MHz, $U = 12$ V_{pp}, sichtbar sind vor allem starke flexure Moden.

8.1.2 Stroboskopische Aufnahmen

Mittels der von uns erstmalig durchgeführten Technik der stroboskopischen Röntgentopographie (zum Verfahren siehe "Stroboskopische Röntgentopographie" auf Seite 10) läßt sich die MHz.-Schwingung trotz einer Belichtungsdauer von einigen Sekunden phasenaufgelöst darstellen. Mit einer Schrittweite von minimal zwei Nanosekunden können stroboskopische Aufnahmen von z.B. der thickness-shear - Grundwelle aufgenommen werden. Die Kristallebenen schwingen parallel zur Filmebene, so daß das Schwingungsbild ein etwa rundes Muster ergibt. Die runden Elektroden decken die Kristallfläche nur zum Teil ab, und so fällt die Schwingungsamplitude zum Rande des Kristalles hin ab. Abbildung 73 auf Seite 102 zeigt eine Halbwelle vom einen Maximum über den Nulldurchgang bis zum zweiten Maximum. Da der Röntgenfilm eine große Intensitätsvariation als das Fotopapier verarbeiten kann, wird Abbildung 73, auf der nicht schwingungsbedingte Kontraste nahezu verdrängt werden, durch Abbildung 74 auf Seite 103 bis Abbildung 76 auf Seite 104 ergänzt, die mit individuell verschiedenen Belichtungszeiten abgezogen wurden. Bei entsprechend langer Belichtung ist es innerhalb eines gewissen Phasenbereiches sogar möglich, noch "unter" dem Schwingungscontrast befindliche Versetzungslinien sichtbar zu machen.

Zu den nachfolgenden drei Abbildungen im einzelnen : Abbildung 74 auf Seite 103 zeigt den schwingenden Quarz gerade zum Zeitpunkt des Nulldurchganges. Im Vergleich zum ruhenden Kristall (siehe Abbildung 31 auf Seite 52) fällt auf, daß die Pendellösungsstreifen des Randbereiches verschwunden sind; nach der in "Ebene Welle." auf Seite 21 dargestellten Theorie deutet dies auf eine Verzerrung des (im Ruhezustand relativ perfekten) Gitters hin. Abbildung 75 und Abbildung 76 auf Seite 104 zeigen eine anwachsende akustische Schwingung im Abstand von 40 ns. Die Versetzungscontrasten variieren leicht, ein Punkt, auf den in "Bewegte Versetzungen" auf Seite 126, speziell bei der Erklärung zu Abbildung 106 auf Seite 126 und Abbildung 107 auf Seite 126 näher eingegangen wird.

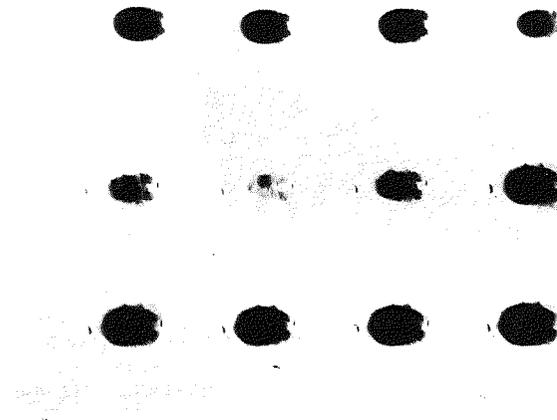


Abbildung 73. Stroboskopische Projektionstopogrammsequenz des 1.04 MHz-AT-Quarzes: Es handelt sich um den von uns hauptsächlich untersuchten Quarz, der aufgrund seiner exakt mit der Umlauffrequenz des Speicherringes DORIS übereinstimmenden Resonanzfrequenz stroboskopisch untersucht werden konnte. Um unterschiedliche Entwicklungsprozesse zu vermeiden, wurden alle Aufnahmen auf demselben Film aufgenommen. Reflex : 10:2, $U = 4 V_{pp}$, $\lambda \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$; Phasenvariation von oben links beginnend in Schritten von jeweils $\pi/12$ (40ns).

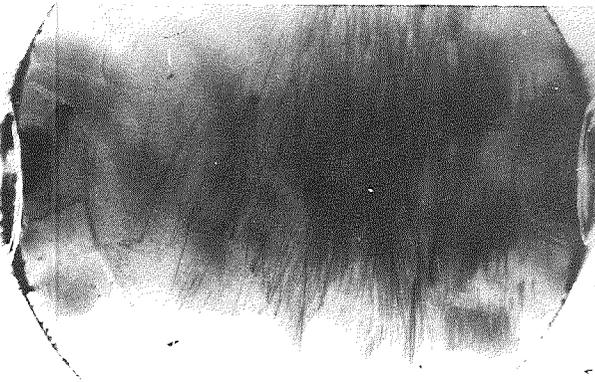


Abbildung 74. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes im Nulldurchgang: 10-2-Reflex, 12 V_{pp} .

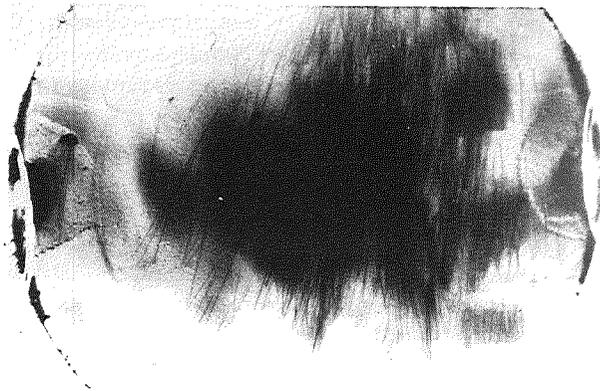


Abbildung 75. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes 40 ns nach Nulldurchgang: 10-2-Reflex, 12 V_{pp} .

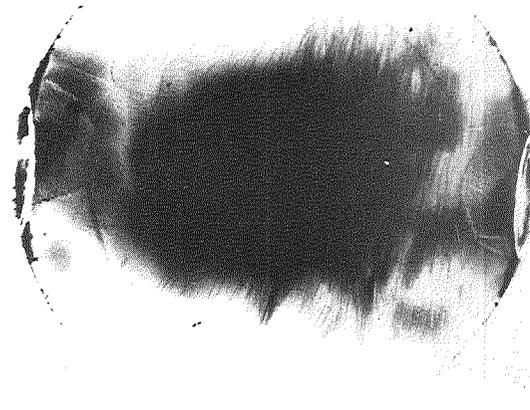


Abbildung 76. Stroboskopische Projektionstopogramm des 1.04 MHz-AT-Quarzes 80ns nach Nulldurchgang: 10-2-Reflex, 12 V_{pp} .

8.2 SEKTIONSTOPOGRAMME

Das Schwingungsmuster der thickness-shear - Oberwellen unterscheidet sich von dem der Grundwelle im Projektionstopogramm nicht sichtbar (wie Abbildung 71 auf Seite 100 zeigt), da in beiden Fällen alle Ebenen parallel zur Filmebene schwingen. Eine Auflösung wird jedoch im Sektionstopogramm möglich.

8.2.1 Phasenintegrierte Aufnahmen

Phasenintegrierte Sektionstopogrammaufnahmen von akustischen Wellen in Kristallen sind mir nicht bekannt, doch gibt es Arbeiten, die die Intensitätsmodulation entlang der y' -Richtung (Quarz-Dicke) in einer der Sektionstopographie ähnlichen Methode mit Szintillationszählern vermessen haben.¹²⁰ Phasenintegrierte Sektionstopogramme zeigt die folgende Abbildung 78 auf Seite 105 für die Grundwelle und Abbildung 79 auf Seite 105 für die 3. Oberwelle. Durch die Phasenintegration bedingt ist der Kontrast mäßig.

¹²⁰ beispielsweise Bennett, A.L. et al, Applied Physics Letters vol 2 no 8 (1963)

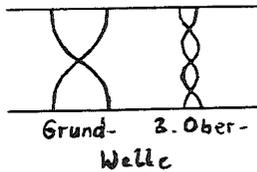


Abbildung 77. Skizze von Grund- und Oberwellen der thickness-shear - Schwingungsmode



Abbildung 78. Phasenintegriertes Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz, $U = 10V_{pp}$.

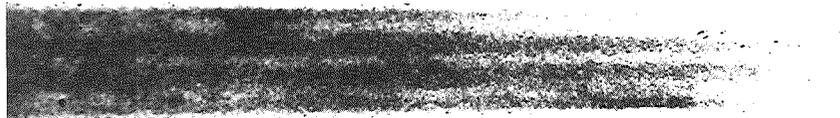


Abbildung 79. Phasenintegriertes Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle: $\nu_{Res} = 3.12$ MHz., $U = 10.5V_{pp}$.

8.2.2 Stroboskopische Aufnahmen

8.2.2.1 Die thickness-shear - Schwingungsmode

Besser aufgelöst werden die Grund- und Oberwellen durch die stroboskopische Aufnahme der Sektionstopogramme. Eindeutig zu sehen sind die zwei Krümmungmaxima der Grundwelle in Abbildung 80 und Abbildung 81, dort dargestellt für zwei unterschiedliche Phasenlagen ebenso die vier Maxima der dritten Oberwelle in Abbildung 82 auf Seite 107 und Abbildung 83 auf Seite 107.



Abbildung 80. Stroboskopisches Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle im Nulldurchgang: Reflex $1\bar{2}2$, $U = 10 V_{pp}$.



Abbildung 81. Stroboskopisches Sektionstopogramm der thickness-shear - Grundwelle nahe Maximum: Reflex $1\bar{2}2$, Phase : $\pi/6$ vor Maximum, $U = 10 V_{pp}$.



Abbildung 82. Stroboskopisches Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Minimum: $\nu_{Res} = 3.12$ MHz., Phase nahe Minimum, $U = 16 V_{pp}$.



Abbildung 83. Stroboskopisches Sektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Maximum: $\nu_{Res} = 3.12$ MHz., Phase nahe Maximum, $U = 16 V_{pp}$.

8.2.2.2 Nebenmoden

Die letzten beiden Topogramme zeigen bereits deutlich, daß die thickness-shear - Schwingungsmode von Nebenmoden überlagert ist. Die Form dieser Nebenmoden wird anschaulicher, wenn man die Aufnahmen durch ein stroboskopisches Projektionstopogramm ergänzt :

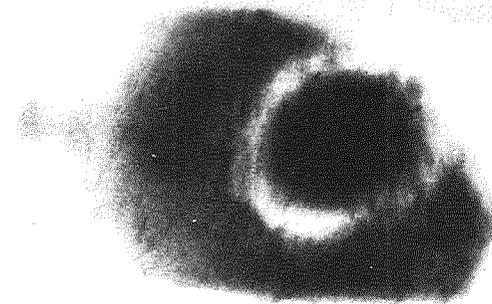


Abbildung 84. Stroboskopisches Projektionstopogramm der 3. thickness-shear - Oberwelle nahe Maximum: $\nu_{Res} = 3.12$ MHz., Phase nahe Maximum, $U = 16 V_{pp}$. Die Aufnahme entspricht Abbildung 83.

Weitere Einzelheiten, die die phasenintegrierten Aufnahmen völlig verbergen, werden insbesondere in der Umgebung des Nulldurchganges sichtbar. Es erscheint eine Nebenmode mit einer Intensitätsmodulierung sowohl in x- als auch in y'-Richtung. Durch das "Umklappen" ihres Musters am Nulldurchgang der thickness-shear - Mode ermöglicht sie eine Unterscheidung der ansonsten völlig identisch aussehenden Halbwellen der MHz-Schwingung. Abbildung 85 bis Abbildung 90 auf Seite 110 zeigen sechs Aufnahmen kurz vor, an und kurz nach den beiden Nulldurchgängen der thickness-shear - Grundmode.

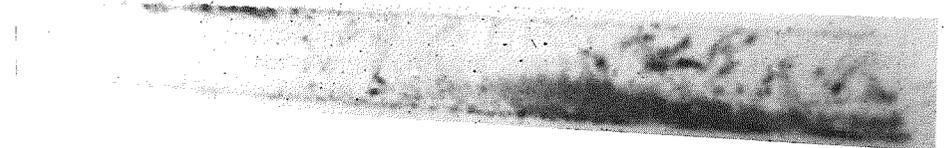


Abbildung 85. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden vor Nulldurchgang I: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : $1/48 \pi$ vor Minimum I, Reflex : 11.2 , $U = 10 V_{pp}$



Abbildung 86. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden am Nulldurchgang I: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : Minimum I, Reflex : $\overline{11} \cdot 2$, $U = 10 V_{pp}$.

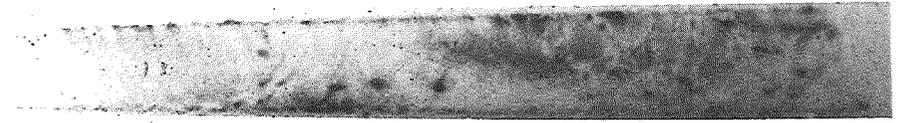


Abbildung 89. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden am Nulldurchgang II: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : Minimum II, Reflex : $\overline{11} \cdot 2$, $U = 10 V_{pp}$.

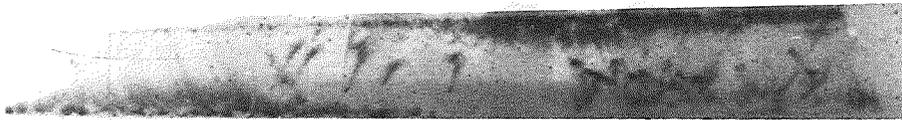


Abbildung 87. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden nach Nulldurchgang I: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : $1/48 \pi$ nach Minimum I, Reflex : $\overline{11} \cdot 2$, $U = 10 V_{pp}$.

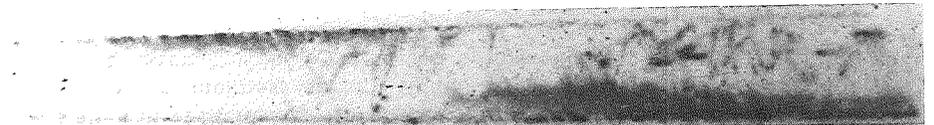


Abbildung 90. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden nach Nulldurchgang II: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : $1/48 \pi$ nach Minimum II, Reflex : $\overline{11} \cdot 2$, $U = 10 V_{pp}$.



Abbildung 88. Stroboskopisches Sektionstopogramm: Nebenmoden vor Nulldurchgang II: $\nu_{Res} = 1.04$ MHz., Phase : $1/48 \pi$ vor Minimum II, Reflex : $\overline{11} \cdot 2$, $U = 10 V_{pp}$.

Eine Erhöhung der Anregungsspannung verstärkt diese Nebenmoden im Vergleich zur thickness-shear - Schwingung noch (siehe Abbildung 91 / Abbildung 92), so daß hier eine Beeinträchtigung des elektrischen Resonanzverhaltens vermutet werden kann. Selbst bei starker t_1 - Mode ist die Nebenwelle im Oberflächenbereich noch dominierend (siehe Abbildung 93 auf Seite 112 / Abbildung 94 auf Seite 112).



Abbildung 91. Stroboskopisches Sektionstopogramm : Nebenmoden bei hoher Spannung: Phase : nahe bei Nulldurchgang, Reflex : 12:2, U = 25 V_{pp}.



Abbildung 92. Stroboskopisches Sektionstopogramm : Nebenmoden bei hoher Spannung: Phase : nahe bei Nulldurchgang, Reflex : 11:2, U = 25 V_{pp}.

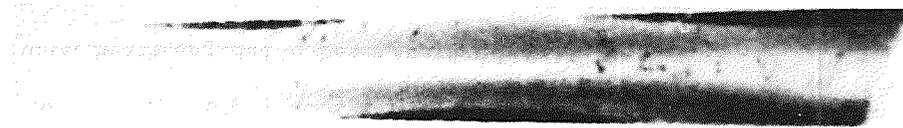


Abbildung 93. Stroboskopisches Sektionstopogramm : Nebenmoden bei hoher Spannung: Phase : um $\pi/12$ weiter vom Nulldurchgang entfernt als bei Abbildung 91, Reflex : 12:2, U = 25 V_{pp}.

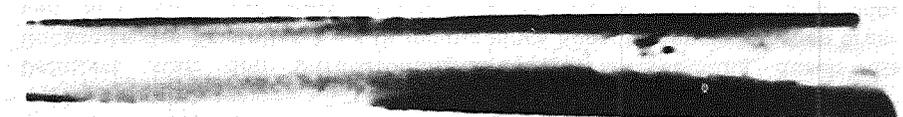


Abbildung 94. Stroboskopisches Sektionstopogramm : Nebenmoden bei hoher Spannung: Phase : um $\pi/12$ weiter vom Nulldurchgang entfernt als bei Abbildung 92 auf Seite 111, Reflex : 11:2, U = 25 V_{pp}.

8.3 RESUMEE BETREFFEND DIE ABBILDUNG AKUSTISCHER SCHWINGUNGEN

Die vorstehenden Topogramme zeigen, daß es möglich ist, mittels stroboskopischer Röntgentopographie resonante akustische Schwingungen in Kristallen abzubilden. Der Bereich der geeigneten Resonanzfrequenzen reicht von etwa 1 - 100 MHz., wobei diese Frequenz ein exaktes Vielfaches der Frequenz der umlaufenden Elektronen von 1.040975 MHz. sein muß. Die erzielte Zeitauflösung liegt bei 2ns und ist bei entsprechend stabiler Triggerung nur durch die Bunchlänge von etwa 200 ps begrenzt. Die Aufnahmen beinhalten sowohl Projektions- als auch Sektionstopogramme, so daß eine vollständige Rekonstruktion der dreidimensionalen Schwingungsform möglich ist.

Die Aufnahmen zeigen, daß die eigentlich bei einem AT-Quarz als nebenmodenarm zu erwartende thickness-shear - Schwingung deutliche Nebenmoden aufweist, vor allem in der Nähe des Nulldurchganges. Diese

Nebenmoden, die in der herkömmlichen phasenintegrierten Röntgentopographie völlig verdeckt werden, können nun in ihrem Verhalten in Abhängigkeit von äußeren Parametern, wie z.B. der angelegten Spannung und der Form des Quarzes, untersucht werden. Die vorstehenden Topogramme zeigen, daß mit zunehmender Spannung auch das Verhältnis von Grund- zu Nebenschwingung im Bereich des Nulldurchganges schlechter wird. Insbesondere eröffnet die stroboskopische Röntgentopographie die Möglichkeit, den Einfluß derartiger Nebenmoden auf das elektrische Resonanzverhalten im Hinblick auf dessen Optimierung zu untersuchen. Die experimentelle Beobachtung, daß der Nebenmodenkontrast hauptsächlich nahe der Oberfläche auftritt und daß er andererseits während des Nulldurchganges quer durch den Kristall verläuft, legt die Frage nahe, ob es sich um Oberflächenwellen handelt und inwieweit derartige Oberflächenwellen an Volumenwellen koppeln.

Dies führt weiterhin auf die Möglichkeit, Oberflächenwellen (beispielsweise in elektronischen Filtern) abzubilden. Erste Versuche in diese Richtung haben bereits erfolgversprechend begonnen.

Das Verfahren der stroboskopischen Röntgentopographie ist nicht an resonante Schwingungen gebunden. Auch entsprechend getriggerte laufende Wellen können abgebildet werden, soweit sie einen sichtbaren Röntgenkontrast liefern. Auch hierzu liegen erste Aufnahmen vor.

Bei allen diesen akustischen Wellen bietet die stroboskopische Röntgentopographie darüberhinaus die Möglichkeit, das Verhalten dieser Wellen in nichtperfekten Regionen des Kristalles zu beobachten. Die Wechselwirkung zwischen akustischen Wellen und Versetzungen als ein derartiges Beispiel wird im folgenden Kapitel beschrieben. Die Interpretation der dabei auftretenden Bilder muß Hand in Hand mit der Interpretation der Schwingungskontraste gehen.

9.0 RAUMLICHE LAGE VON VERSETZUNGEN

Als Grundlage für die Berechnung räumlicher Koordinaten wurden in Abbildung 95 auf Seite 116 die relativen Lagen so gewählt, daß sie dem hauptsächlich untersuchten $\bar{1}\bar{2}$ -Reflex entsprechen. Dieser Reflex hat eine negative Horizontalkomponente des Bragg-Winkels, weshalb im folgenden alle physikalischen Größen den oberen Index " - " erhalten, wenn sie sich auf diesen Reflex beziehen, wohingegen die vom Stereo-Reflex $\bar{1}\bar{1}$ -2 abgeleiteten Variablen wegen dessen positiver Horizontalkomponente den oberen Index " + " erhalten.

9.1 UNBEWEGTE VERSETZUNGEN

9.1.1 Herleitung der Berechnung der Ruhelage

In diesem Kapitel soll hergeleitet werden, wie man aus den Topogrammen die räumliche Lage der Versetzungen bestimmen kann. Wenn diese Lage mit Hilfe von Sektionstopogrammen bestimmt werden soll, muß jeweils auch ein Projektionstopogramm ausgewertet werden, da nur dann alle Parameter bekannt sind; in einem ersten Schritt muß also eine Zuordnung zwischen den linienförmigen Versetzungskontrasten des Projektionstopogrammes und den punktförmigen Versetzungskontrasten des Sektionstopogrammes erfolgen, was durch eine Einbettung des Sektionstopogrammes in das Projektionstopogramm gemäß Abbildung 64 auf Seite 91 oder Abbildung 66 auf Seite 92 erfolgt.

Definiert man den Durchstoßungspunkt der Versetzung durch die Rückseite des Kristalles A als Ursprung eines Koordinatensystems, so ergeben sich die Koordinaten eines anderen Punktes B⁻ (b_1^-, b_3^-) oder C⁻ (c_1^-, c_3^-) auf dieser Versetzung, bezogen auf den Punkt A⁻ im Ursprung des Koordinatensystems f_1, f_3 , jeweils aus der Auswertung eines Projektions-/Sektions-Topogramm - Paares gemäß den nachfolgend abgeleiteten Formeln; jede Versetzung hat also ihr eigenes Koordinatensystem.

Koordinaten eines Punktes B auf der Kristallvorderseite

Die Punkte A und B seien die Durchstoßungspunkte einer Versetzungsgeraden durch die Rück- bzw. Vorderseite eines Kristalles. In Abbildung 96 auf Seite 117 ist die Berechnung der z'-Komponente offensichtlich:

$$(10) \quad b_{z'} = b_3^- - t \cdot \tan 2\theta_1$$

unter Beachtung, daß in dieser Anordnung $b_{z'} < 0$, $\theta_1 > 0$ gilt.

Die Berechnung der x-Komponente verläuft analog, verlangt jedoch unter dem Betrachtungswinkel von Abbildung 96 auf Seite 117 ein höheres räumliches Vorstellungsvermögen :

$$(11) \quad b_x = b_{-1} - t \cdot \tan 2\theta_1$$

unter Beachtung, daß in dieser Anordnung $b_y < 0$, $\theta_1 < 0$ gilt.

Koordinaten eines beliebigen Punktes C auf der Versetzung AB

Angenommen, der Strahl werde so ausgeblendet, daß er horizontal den Kristall durchdringt ($z' = \text{constant}$). Der bestrahlte Punkt der Versetzung AB sei C mit den Koordinaten (c_x, c_y, c_z) und den Gleichungen

$$(12) \quad c_z = c_{-3} + c_y \cdot \tan 2\theta_1$$

$$(13) \quad c_x = c_{-1} + c_y \cdot \tan 2\theta_1$$

Gemäß Abbildung 97 auf Seite 118 wird dann die Gerade r als Schnitt von Strahlebene und Kristallrückwand auf die Gerade r^- , die Gerade v als Schnitt von Strahlebene und Kristallvorderwand auf die Gerade v^- abgebildet. r^- und v^- bilden gerade die horizontalen Grenzlinien des zu C⁻ gehörenden Sektionstopogrammes.

Bezeichnet man nun die vertikale Höhe eines Punktes C⁻ im Sektionstopogramm mit c_h^- (stets ≥ 0), so gilt

$$(14) \quad c_y = -c_h^- \cdot \cot 2\theta_1$$

Für den Fall, daß die Dicke des Kristalles bekannt ist, läßt sich dies umformen durch

$$b_y = -t = -b_h^- \cdot \cot 2\theta_1$$

über

$$c_y = -c_h^- / b_h^- \cdot t$$

zu

$$(14') \quad c_y = -c_h^- / h \cdot t$$

mit $h =$ vertikale Höhe des Sektionstopogrammes.

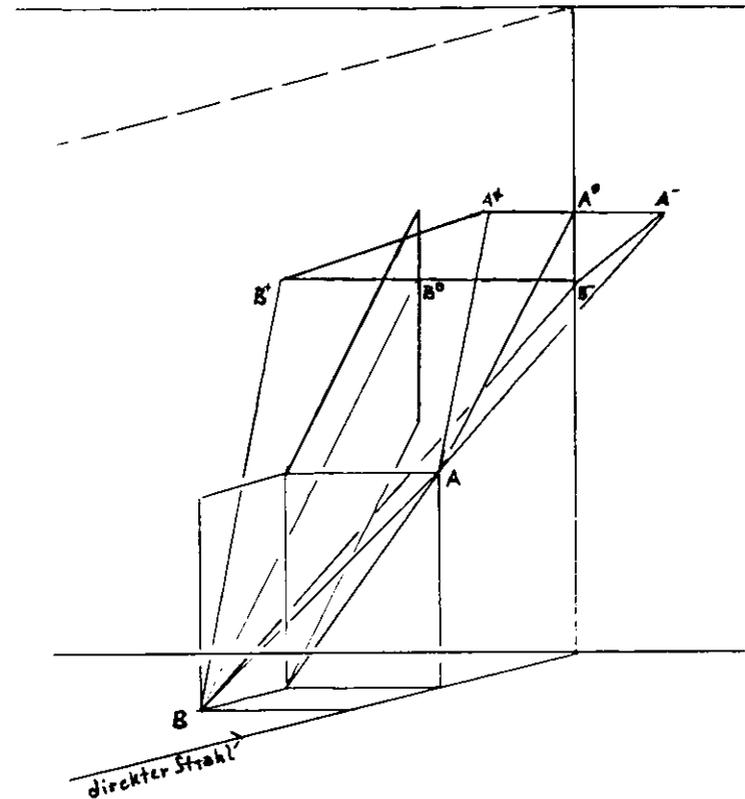


Abbildung 95. Zeichnung für Kristall- und Topogramm - Koordinaten: Der direkte Strahl verläuft von hinten links nach vorne rechts in Richtung der y' -Achse. Die Punkte A (auf der Rückseite des Kristalles) und B (auf der Vorderseite des Kristalles) werden nach oben rechts auf die Punkte A⁻ und B⁻ in der Filmebene abgebildet. Einem θ -Winkel ohne horizontaler Komponente würden die Bildpunkte A⁰ und B⁰ entsprechen, der Stereo-Reflex hat die Bildpunkte A* und B*. Die Filmebene entspricht der Papierebene.

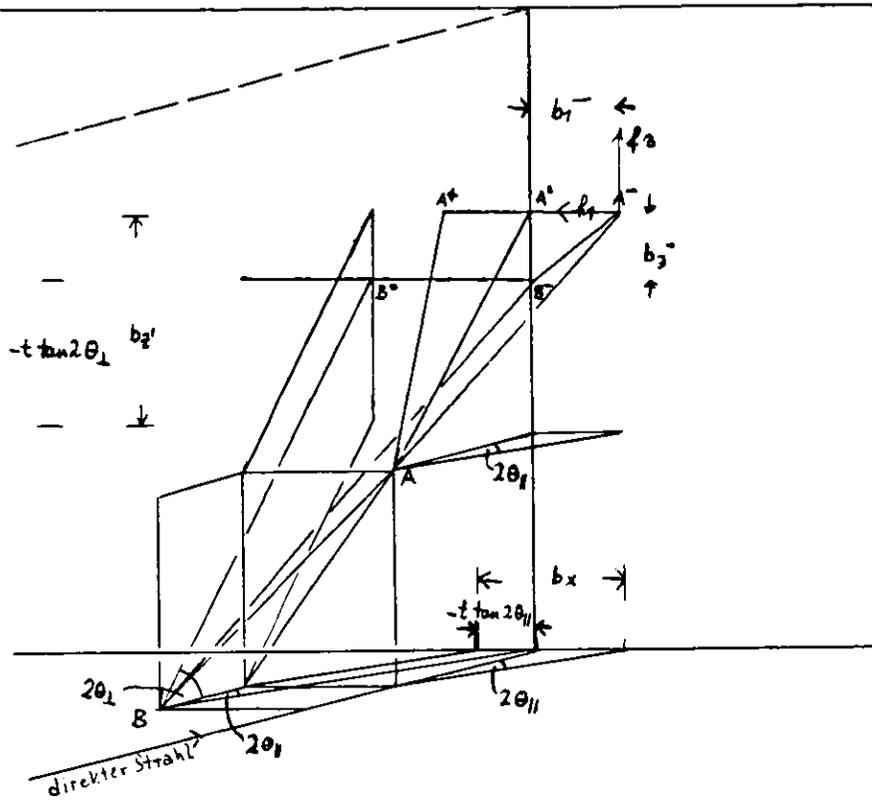


Abbildung 96. Darstellung der Berechnung der x- und z'-Komponente: Es gilt $b_y = -t$, mit t = Dicke des Kristalles, alle übrigen Größen so wie bisher definiert.

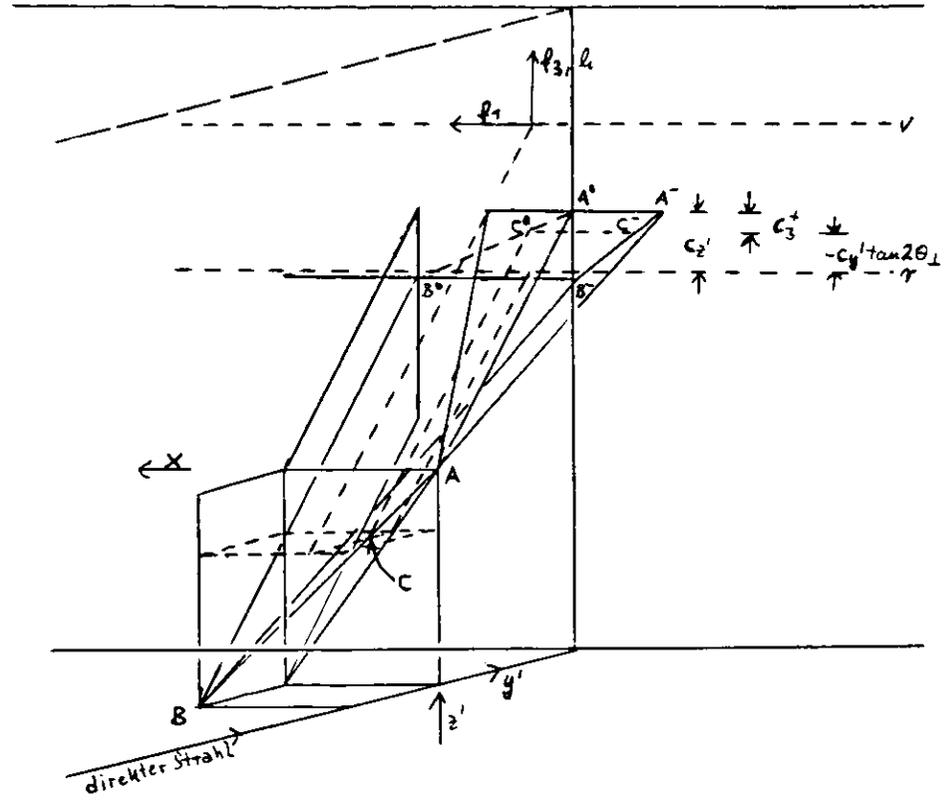


Abbildung 97. Darstellung der Berechnung der y'-Komponente: Ein Sektionstopogramm ergibt die Abbildung von C nach C'. Eingezeichnet sind zusätzlich die obere und untere Grenze des Sektionstopogrammes, die einer Abbildung von der Vorder- bzw. Rückseite entsprechen.

Koordinatenberechnung bei variierender Kristalldicke. In Anbetracht der bikonvexen Form der Quarzscheibe müssen t und h in Abhängigkeit von dem Abstand des betreffenden Punktes vom Zentrum des Quarzes eingesetzt werden. Dabei ist zu beachten, daß die zu einem Versetzungspunkt gehörende Sektionstopogramm-Höhe h_1 entsprechend dem Winkel σ verschoben ist und neben dem Sektionstopogramm-Punkt liegt :

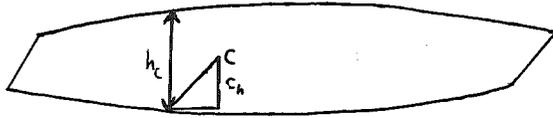


Abbildung 98. Zur Bestimmung der Sektionstopogramm-Höhe

Die Formeln des vorigen Abschnittes gehen dann¹²¹ über in :

$$x = c_1 - c_h \cdot \cot 2\theta_{\perp} \cdot \tan 2\theta_{\parallel}$$

und mit Formel (3) und (4)

$$(15) \quad x = c_1 + c_h \cdot \cot \sigma$$

$$(16) \quad y' = -c_h \cdot \cot 2\theta_{\perp}$$

$$(17) \quad z' = c_3 - c_h$$

¹²¹ um die Übersichtlichkeit zu wahren, verzichte ich im folgenden auf einige Indizes : Im realen Koordinatensystem wird das bisherige Tupel (c_x, c_y, c_z) übergehen in (x, y, z') ; welcher Punkt jeweils gemeint ist, geht aus dem Zusammenhang hervor. Wegen der leichten Verwechslungsmöglichkeit von c_h und h_c soll nun stets gelten :

$c_2 = c_h$ = Höhe des Punktes c im Sektionstopogramm über der Grundlinie (entspr. d. Rückseite d. Kristalles),

h_c = Höhe des Sektionstopogrammes am Punkt c .

und der Übergang vom AT- zum Quarz-System erfolgt über die Formeln (1) bis (3) des Kapitels "Koordinatentransformation" auf Seite 44:

$$(18) \quad y = z' \sin(-35.25^\circ) + y' \cos(-35.25^\circ)$$

$$(19) \quad z = z' \cos(-35.25^\circ) + y' \sin(-35.25^\circ)$$

9.1.2 Die Ruheposition dreier ausgewählter Versetzungen

Ein Blick auf Abbildung 64 auf Seite 91 oder Abbildung 66 auf Seite 92 zeigt im linken Bereich des Quarzes eine niedrige, im rechten Bereich eine hohe Versetzungskonzentration. Bereits in der Ruheposition, erst recht bei einer Bewegung ist der rechte Bereich sehr unübersichtlich und die Bewegung einer bestimmten Versetzung ist nicht eindeutig von anderen kreuzenden Bahnen trennbar.¹²²

Bei der Auswertung habe ich mich deshalb, nachdem eine Übersicht über die Bewegung aller Versetzungen im linken Teilbereich erstellt worden war, auf drei typische und gut verfolgbare Versetzungen V1, V2 und V3 konzen-

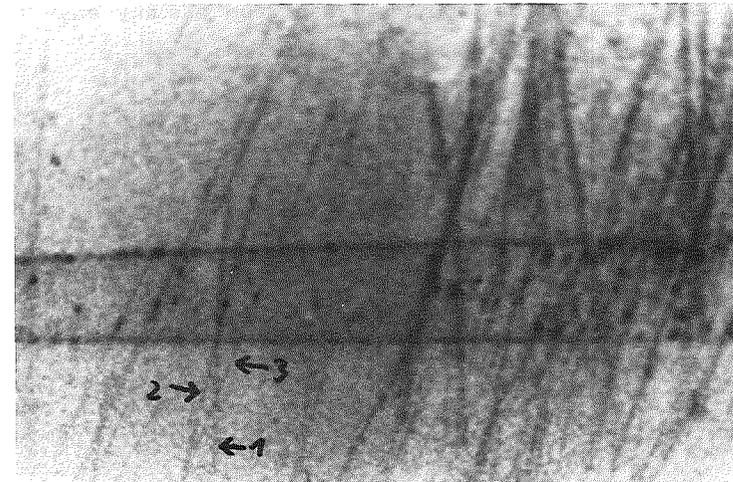


Abbildung 99. Versetzungen V1- V3 im $\bar{1}2\cdot 2$ -Reflex

¹²² Siehe die Topogramme von Abbildung 109 auf Seite 127 und Abbildung 110 auf Seite 128.

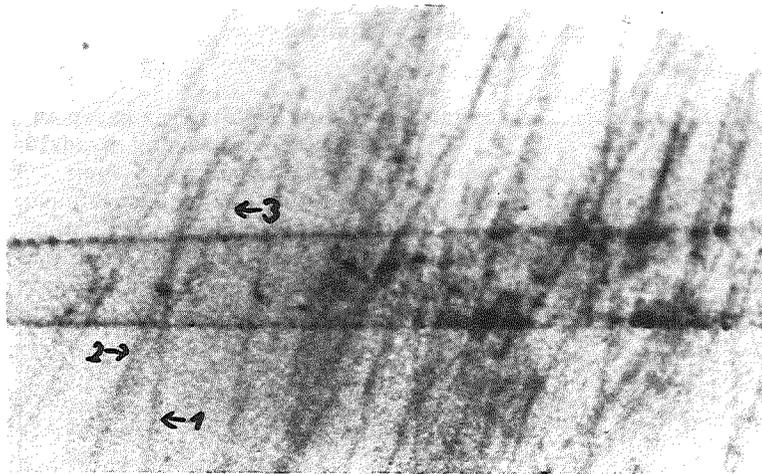


Abbildung 100. Versetzungen V1- V3 im $\bar{1}\bar{1}$ -2-Reflex

triert, die in den nachfolgenden Topogrammen von Abbildung 99 und Abbildung 100 auf Seite 121 mit "1", "2" und "3" gekennzeichnet sind. Für diese drei Versetzungen wird die Berechnung der räumlichen Lage des einen Punktes in Tab. 11 dargestellt.

	V1	V2	V3
t_1 [mm]	1.765	1.760	1.790
h_1^- [mm]	0.471	0.469	0.479
h_1^+ [mm]	0.447	0.445	0.553
c_2^- [mm]	0.103	0.199	0.239
c_2^+ [mm]	0.099	0.191	0.222
y'^- [mm]	-0.390	-0.755	-0.892
y'^+ [mm]	-0.386	-0.747	-0.879
y' [mm]	-0.388	-0.751	-0.886

Tabelle 11. Ruheposition von Versetzung V1 bis V3 (etwa in der Mitte der Versetzung) (Teil 1 von 2)

	V1	V2	V3
c_3^- [mm]	-0.668	-0.763	-0.966
c_3^+ [mm]	-0.681	-0.779	-1.034
z'^- [mm]	-0.769	-0.957	-1.220
z'^+ [mm]	-0.780	-0.968	-1.260
z' [mm]	-0.774	-0.963	-1.240
c_1^- [mm]	0.048	0.239	0.429
c_1^+ [mm]	0.103	0.334	0.477
x^- [mm]	0.135	0.406	0.630
x^+ [mm]	0.045	0.223	0.343
x [mm]	0.090	0.314	0.468
y [mm]	0.133	-0.044	-0.008
z [mm]	-0.854	-1.211	-1.524

Tabelle 11. Ruheposition von Versetzung V1 bis V3 (etwa in der Mitte der Versetzung) (Teil 2 von 2)

Um eine Aussage über den gesamten Verlauf dieser drei Versetzungen durch den Kristall zu gewinnen, müssen mehrere Schnitte in verschiedener Höhe durch den Quarz über eine Auswertung mehrerer Sektionstopogramme gewonnen werden. Abbildung 101 auf Seite 123 bis Abbildung 104 auf Seite 124 zeigen je ein Beispiel für einen Schnitt oberhalb und einen unterhalb der Ausgangsaufnahme, jeweils einmal im Reflex $1\bar{2}$:2 und im $\bar{1}\bar{1}$:2.

Zur Auswertung einer Serie von derartigen Sektionstopogrammen wurde das Programm "dislrest" geschrieben, das im Anhang unter "Programm DISLREST" auf Seite 147 zu finden ist. Es ermittelt aus den Daten verschiedener Reflexe die gesuchten Koordinaten, gibt diese einerseits gelistet aus und ermöglicht andererseits die graphische Darstellung der Versetzungen in einer Parallelperspektive. Eine derartige Darstellung der drei untersuchten Versetzungen unter Auswertung einer Sequenz von sieben Sektionstopogrammen jeweils in zwei Reflexen zeigt Abbildung 105 auf Seite 125.

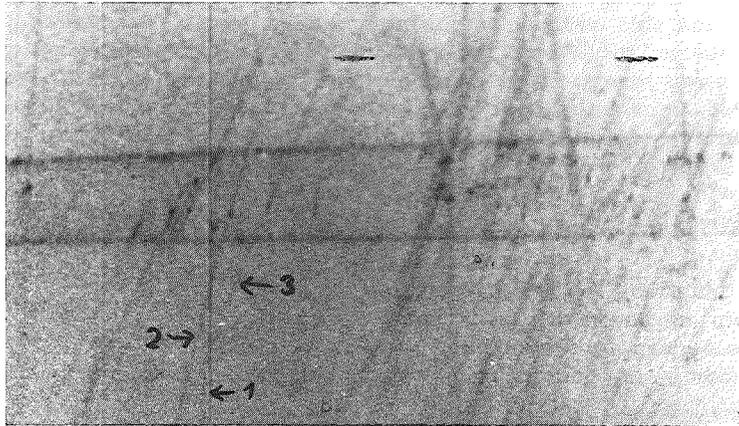


Abbildung 101. Versetzungen V1- V3 im $1\bar{2}\cdot 2$ -Reflex, zweiter Punkt: Bei allen drei Versetzungen liegt dieser zweite Punkt näher an der Rückseite des Kristalles (die Rückseite entspricht der Unterkante des Sektionstopogrammes)

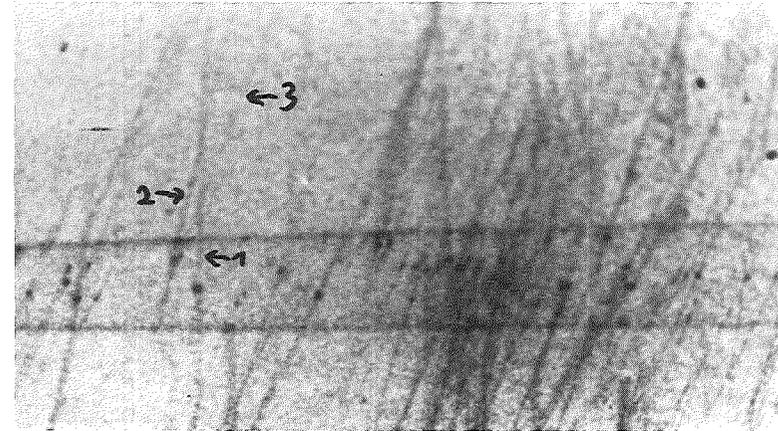


Abbildung 103. Versetzungen V1- V3 im $1\bar{2}\cdot 2$ -Reflex, dritter Punkt: Bei allen drei Versetzungen liegt dieser zweite Punkt näher an der Vorderseite des Kristalles.

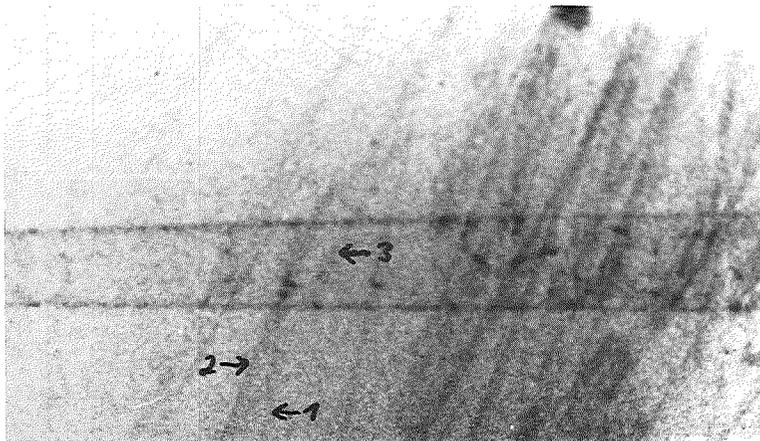


Abbildung 102. Versetzungen V1- V3 im $\bar{1}1\cdot 2$ -Reflex, zweiter Punkt

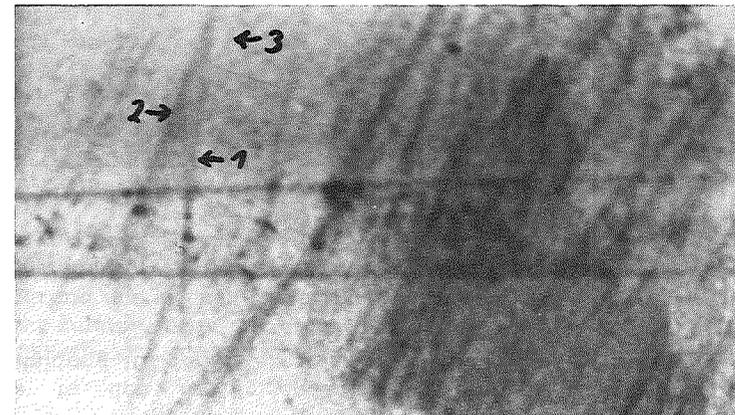
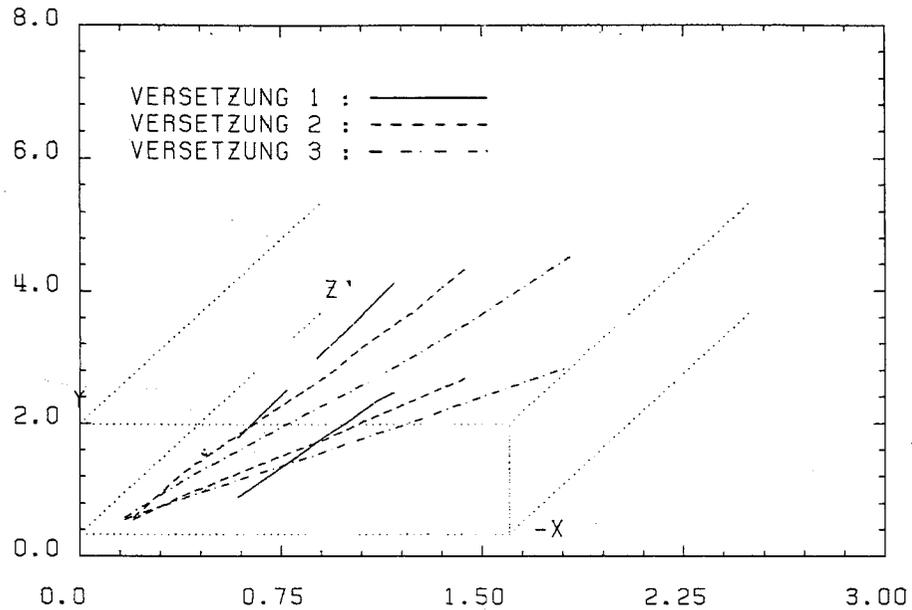


Abbildung 104. Versetzungen V1- V3 im $1\bar{2}\cdot 2$ -Reflex, dritter Punkt

9.2 BEWEGTE VERSETZUNGEN

Bei der Aufnahme von Topogrammen eines schwingenden Quarzes liegt es nahe, nach eventuell auftretenden Veränderungen des Versetzungskontrastes zu suchen. Bereits die ersten stroboskopischen Projektionstopogramme zeigten u.a. phasenabhängige Aufspaltungen, wie sie in den nachfolgenden Topogrammen von Abbildung 106 und Abbildung 107 dargestellt werden.



VERSETZUNGSBLAGE IM KRISTALL (GESEHEN UNTER 75 GRAD)

Abbildung 105. 3-dimensionale Darstellung der Versetzungen V1-V3: Dargestellt sind sowohl die drei Versetzungen im Raum als auch ihre Projektion in die xz' -Ebene. Aufgrund der Fehlerbreite der Koordinaten, die bis zu 10 % betragen kann, ist zu erwarten, daß die Versetzungen geradenförmig verlaufen.

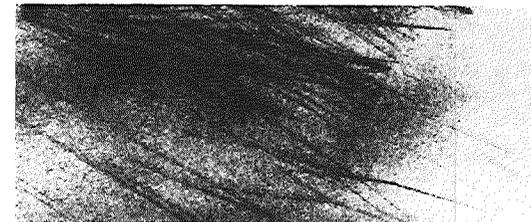


Abbildung 106. Projektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im Nulldurchgang: Ausschnitt aus Abbildung 74 auf Seite 103

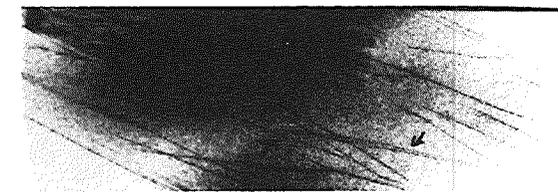


Abbildung 107. Projektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungskontrastes im schwingenden Quarz: Der Bereich, in dem starke Änderungen sichtbar sind, ist gekennzeichnet (Ausschnitt aus Abbildung 75 auf Seite 103).

Bedingt durch den überlagerten thickness-shear - Wellen Kontrast wird die Abbildung mit zunehmender Amplitude schlechter, eine Konsequenz, die im Projektionstopogramm nicht zu umgehen ist. Es liegt deshalb nahe, das Versetzungsverhalten mit Sektionstopogrammen zu untersuchen. Tatsächlich wiesen die stroboskopisch aufgenommenen Sektionstopogramme eine sehr starke phasenabhängige Variation des Versetzungscontrastes auf.

Die nachfolgenden drei Sektionstopogramme zeigen den Versetzungscontrast einmal im ruhenden Kristall (Abbildung 108), und nachfolgend für zwei verschiedene Phasenlagen (Abbildung 109 und Abbildung 110 auf Seite 128).



Abbildung 108. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungscontrastes in Ruheposition: $1\bar{2}\text{-}2$

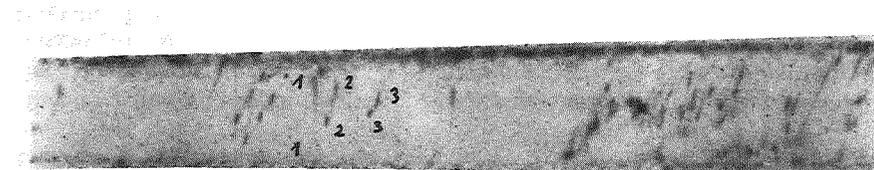


Abbildung 109. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungscontrastes im schwingenden Quarz: $1\bar{2}\text{-}2$, Phase : $3/16\pi$ (90 ns) vor Nulldurchgang, $U = 5 V_{pp}$.

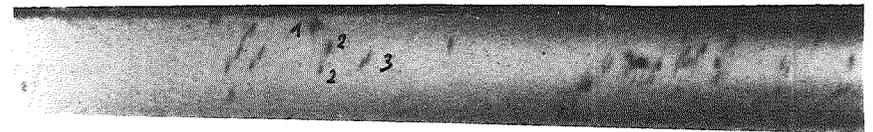


Abbildung 110. Sektionstopogramm zur Darstellung des Versetzungscontrastes im schwingenden Quarz: $1\bar{2}\text{-}2$, Phase : $5/8\pi$ (300 ns) vor Nulldurchgang, $U = 5 V_{pp}$.

Im rechten Teil der Sektionstopogramme ist die Versetzungsdichte so hoch, daß es nicht möglich ist, die Kontraste im schwingenden Quarz eindeutig denen im ruhenden zuzuordnen. Infolgedessen konzentrierte sich die Auswertung auf die linke Hälfte des Sektionstopogrammes. Nachdem in einer Übersicht das Verhalten aller Versetzungen dieses Bereiches zusammengestellt worden war, stellten sich die drei gekennzeichneten Versetzungen als besonders typische und gut auswertbare Vertreter dar. Infolgedessen konzentriert sich die folgende Auswertung auf diese drei Versetzungen.

9.2.1 Auswertung der Versetzungsbewegung unter Annahme kinematischer Kontraste

Im ruhenden Kristall ist die Annahme, daß es sich bei den Versetzungscontrasten um kinematische und nicht um dynamische Kontraste handelt aufgrund der Intensität, der Breite des benutzten Spaltes ($\approx 100 \mu\text{m}$) und nicht zuletzt wegen der Übereinstimmung mit der Kontrollauswertung des $1\bar{1}\text{-}2$ -Reflexes bestätigt worden.

Wegen der Ähnlichkeit der Versetzungscontrastes des schwingenden Quarzes geht die folgende Auswertung von der Annahme kinematischer Kontraste aus. In wie weit diese Annahme haltbar ist, wird die nachfolgende Diskussion zeigen.

Im nachfolgenden Abschnitt werden die benötigten Auswertungsformeln hergeleitet. Dabei ist folgende Modifikation zu beachten: Die Aufnahmen des schwingenden Quarzes wurden in einer etwas veränderten relativen Lage von Kristall zu Film aufgenommen. Insofern verändern sich die Bragg-Winkel etwas (siehe "Schwingender Quarz" auf Seite 93); sie werden im folgenden zur Unterscheidung von den Bragg-Winkeln der Ruheposition mit einer Tilde "~" gekennzeichnet werden.

9.2.1.1 Herleitung der Bewegungsberechnung bei kinematischen Kontrasten

Die Koordinatenberechnung von Versetzungsbewegungen unter Einschluß der Möglichkeit veränderter Sektionstopogramm - Film - Position (der Ausgangspunkt der Versetzung muß jedoch erhalten bleiben) ergibt sich folgendermaßen.

Sei $\vec{r}(0) = (x(0), y'(0), z'(0))$ der Ausgangspunkt und $\vec{r}(t) = (x(t), y'(t), z'(t))$ der vom Eingangsspalt beleuchtete Punkt der Versetzung zum Zeitpunkt t (nicht notwendig identisch mit den Koordinaten des Ausgangspunktes zum Zeitpunkt t !). Dann gilt:

$$x(0) = c_1(0) + c_2(0) \cdot \cot \sigma$$

$$y'(0) = -c_2(0) \cdot \cot 2\theta_1$$

$$z'(0) = c_3(0) - c_2(0)$$

Entsprechend gilt für ein zweites Sektionstopogramm in leicht veränderter Position:

$$x(0) = \tilde{c}_1(0) + \tilde{c}_2(0) \cdot \cot \tilde{\sigma}$$

$$y'(0) = -\tilde{c}_2(0) \cdot \cot 2\tilde{\theta}_1$$

$$z'(0) = \tilde{c}_3(0) - \tilde{c}_2(0)$$

Charakteristische Auslenkung

In Abbildung 111 auf Seite 130 sind zwei der möglichen Versetzungsschwingungsformen angegeben, die im folgenden als "Saitenschwingung" bzw. "Stabschwingung" bezeichnet werden sollen. In welcher Mode die Versetzung tatsächlich schwingt, läßt sich anhand der bisherigen Aufnahmen noch nicht klären, da die zeitabhängigen Sektionstopogramme bisher nur an einer Stelle etwa in der Mitte der Versetzungen aufgenommen wurden. Diese Aufnahmen ermöglichen jedoch

die Ermittlung einer charakteristischen Auslenkungsgröße δ - charakteristisch, weil ihr Maximalwert (während einer zeitlichen Periode) sowohl im Fall einer Saiten-, als auch einer Stabschwingung eine untere Abschätzung der Schwingungsamplitude darstellt.

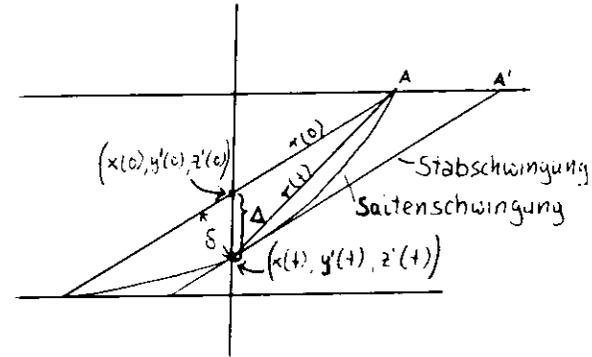


Abbildung 111. Versetzungsschwingungsmoden: Darstellung von "Saitenschwingung", "Stabschwingung", Auslenkung Δ und charakteristische Auslenkungsgröße δ

Wählt man auch für die bewegte Versetzung den Durchstoßungspunkt der Versetzung durch die Rückseite des Kristalles A als Koordinatenursprung, so gilt:

$$x(t) = \tilde{c}_1(t) + \tilde{c}_2(t) \cdot \cot \tilde{\sigma}$$

$$y'(t) = -\tilde{c}_2(t) \cdot \cot 2\tilde{\theta}_1$$

$$z'(t) = z'(0) \quad .123$$

Gemessen werden im Sektionstopogramm:

$$(20) \quad \Delta_1(t) = \tilde{c}_1(t) - \tilde{c}_1(0)$$

$$(21) \quad \Delta_3(t) = \tilde{c}_3(t) - \tilde{c}_3(0) = \tilde{c}_2(t) - \tilde{c}_2(0)$$

¹²³ bedingt durch die Sektionstopogramm - Aufnahmetechnik

Damit folgt :

$$\Delta y'(t) = y'(t) - y'(0) = - \left(\bar{c}_2(t) - \bar{c}_2(0) \right) \cdot \cot 2\bar{\theta}_1$$

$$\Delta x(t) = x(t) - x(0) = \left(\bar{c}_1(t) - \bar{c}_1(0) \right) + \left(\bar{c}_2(t) - \bar{c}_2(0) \right) \cdot \cot \bar{\sigma}$$

Somit gilt letztendlich :

- (22) $\Delta x(t) = \Delta_1(t) + \Delta_3 \cdot \cot \bar{\sigma}$
- (23) $\Delta y'(t) = -\Delta_3(t) \cdot \cot 2\bar{\theta}_1$
- (24) $\Delta z'(t) = 0$
- (25) $\Delta y(t) = -\Delta_3(t) \cdot \cot 2\bar{\theta}_1 \cdot \cos (35.25^\circ)$
- (26) $\Delta z(t) = -\Delta_3(t) \cdot \cot 2\bar{\theta}_1 \cdot \sin (35.25^\circ)$

Der Betrag der charakteristischen Auslenkungsgröße δ ergibt sich aus :

$$\bar{\Delta}(t)^2 = \bar{r}(t)^2 + \bar{r}(0)^2 - 2\bar{r}(t)\bar{r}(0) \cdot \cos \alpha$$

und

$$\sin \alpha = \delta / |\bar{r}(t)|$$

zu

$$(27) \quad \delta = |\bar{r}(t)| \cdot \sin \left[\arccos \left(\left[\bar{r}(t)^2 + \bar{r}(0)^2 - \bar{\Delta}(t)^2 \right] / \left[2 \bar{r}(t)\bar{r}(0) \right] \right) \right]$$

9.2.1.2 Die "Bewegung" dreier ausgewählter Versetzungen

Die eben hergeleiteten Formeln für die Kontrastverschiebungsinterpretation unter der Annahme kinematischer Kontraste sollen nun auf die drei bekannten Versetzungen angewendet werden. Nachfolgend sind die beiden Sektionstopogramme und deren Auswertung in Tab. 12 (S.133) zu ersehen. Die Bezeichnung "positive" bzw. "negative" Halbwellen ist als Unterscheidungsbezeichnung insofern sinnvoll, als die Halbwellen anhand der Schwingungskontraste der Nebenwellen tatsächlich unterscheidbar sind und die Versetzungs - Kontraständerungen in beiden Halbwellen unterschiedlich sind; die Festlegung, welche als "positiv" definiert wird, ist natürlich willkürlich.

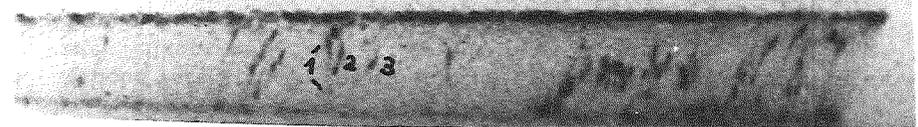


Abbildung 112. Sektionstopogramm zur Versetzungsbewegung am Beginn der positiven Halbwellen: Die Aufnahme zeigt die Kontrastkonstellation zum Zeitpunkt $t_1 = 19/240 \cdot \pi$,



Abbildung 113. Sektionstopogramm zur Versetzungsbewegung am Beginn der negativen Halbwellen: Die Aufnahme zeigt die Kontrastkonstellation zum Zeitpunkt $t_2 = \pi + 23/240 \cdot \pi$

9.2.2 Diskussion der Bewegungsergebnisse

Die gewonnenen Ergebnisse erscheinen aus mehreren Gründen physikalisch nicht sinnvoll zu sein. Die Hauptargumente sind die folgenden :

1. Wie in Kapitel "Peierls-Barriere" auf Seite 76 dargestellt wurde, erfordert jede Versetzungsbewegung die Überwindung der Peierlsbarriere, die für die hauptsächlich kovalente Quarz-Bindung in der Größenordnung von $\sigma_p \approx 10^{-2} \mu$ liegen sollte.

Die Ergebnisse der Berechnungen für den von uns benutzten Quarz ergeben nach "Ergebnisse für den von uns benutzten Quarz" auf Seite 57 jedoch einen Wert von $S_0(y) \approx 2.2 \cdot 10^{-4} \cos ky \sin \omega t$, eine Amplitude also, die eher in der Größenordnung für den Aufbruch metallischer Bindungen liegt.

Nun ist die Peierlsbarriere wie erwähnt mit einigen Unsicherheiten behaftet ; jedenfalls läßt der Vergleich nur den Schluß zu, daß eine starke, schnelle Bewegung unwahrscheinlich ist.

2. In diesem Zusammenhang erscheinen die hohen Geschwindigkeiten, die sich in Tab. 12 (S.133) ergeben, unwahrscheinlich. Die Tatsache, daß sie ein Vielfaches der Schallgeschwindigkeit in Quarz (die bei etwa $3.3 \cdot 10^3 \text{m/s}$ liegt), betragen, macht das Ergebnis erst recht fragwürdig.
3. Bei einer sinusförmigen thickness-shear - Schwingung erwartet man, daß sich die Versetzung in der einen Halbwelle in die Gegenrichtung im Vergleich zur anderen Halbwelle bewegen sollte. Beobachtet wird jedoch bei allen Versetzungskontrasten, die sich überhaupt bewegen, daß sie sich in beiden Halbwellen jeweils in dieselbe Richtung bewegen - einige Versetzungen stets von "oben nach unten" im Sektionstopogramm, andere immer von "unten nach oben". Bei entsprechend komplizierten Bindungskräften läst sich ein derartiges Verhalten zwar nicht ausschließen, jedenfalls erscheint es aber eine unwahrscheinliche Bewegungsart zu sein.
4. Manche Versetzungen zeigen im schwingenden Fall eine Aufspaltung in zwei Teilkontraste, die nur z.T. miteinander noch eine schwache Verbindungslinie zeigen. Zwar gibt es durchaus die Möglichkeit der Versetzungsdissoziation doch haben Arbeiten von Trepied und anderen gezeigt, daß dies nur in wenigen Fällen energetisch günstig ist.¹²⁴ Im

¹²⁴ Siehe Trepied, L., Doukhan, J.-C., phys.stat.sol.(a) 49, S.713-24 (1978) und Trepied, L., Doukhan, J.C., Journ. Mat. Science 13, 492 - 498 (1978)

	V1	V1	V2	V2	V3	V3
	t1	t2	t1	t2	t1	t2
Δ_1^- [mm]	0.016	-0.024	-0.032	-0.016	-0.032	-0.024
Δ_3^- [mm]	0.207	0.254	0.095	0.175	0.032	0.111
Δx^- [mm]	0.108	0.089	0.010	0.062	-0.017	0.025
Δy^- [mm]	-0.876	-1.074	-0.402	-0.740	-0.135	-0.470
Δz^- [mm]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Δy^- [nm]	-0.716	-0.879	-0.329	-0.606	-0.111	-0.384
Δz^- [nm]	-0.506	-0.621	-0.232	-0.428	-0.078	-0.271
$x^-(0)$ [mm]	0.090	0.090	0.314	0.314	0.468	0.468
$y^-(0)$ [mm]	0.133	0.133	-0.044	-0.044	-0.008	-0.008
$z^-(0)$ [mm]	-0.854	-0.854	-1.211	-1.211	-1.524	-1.524
$x^-(t)$ [mm]	0.198	0.179	0.324	0.376	0.451	0.493
$y^-(t)$ [mm]	-0.583	-0.746	-0.373	-0.650	-0.119	-0.392
$z^-(t)$ [mm]	-1.360	-1.475	-1.443	-1.639	-1.602	-1.795
$r^-(0)$ [mm]	0.869	0.869	1.252	1.252	1.600	1.600
$r^-(0)^2$ [mm ²]	0.755	0.755	1.567	1.567	2.559	2.559
$r^-(t)$ [mm]	1.493	1.663	1.525	1.803	1.669	1.902
$r^-(t)^2$ [mm ²]	2.229	2.764	2.326	3.250	2.784	3.619
$\Delta^-(t)$ [mm]	0.883	1.080	0.403	0.744	0.137	0.471
$\Delta^-(t)^2$ [mm ²]	0.780	1.166	0.162	0.554	0.019	0.222
α^-	31.9°	35.5°	12.3°	19.2°	4.5°	11.9°
$\delta^-(t)$ [mm]	0.789	0.966	0.325	0.593	0.131	0.392
t [ns]	38	46	38	46	38	46
v^- [10^3m/s]	20.7	21.0	8.6	12.9	3.4	8.5

Tabelle 12. Versetzungsbewegung in positiver und negativer Halbwelle

allgemeinen wäre also noch eine zusätzliche Energie aufzubringen, was in Verbindung mit dem ersten Punkt die Interpretation der Kontraste als kinematische Kontraste zunehmend unwahrscheinlicher macht.

Die Summe dieser kritischen Punkte führte zu einer Überprüfung der aus dem $\bar{1}\bar{2}$ -Reflex gewonnenen Werte von Tab. 12 (S.133) durch Auswertung eines weiteren Reflexes, des Stereoreflexes $\bar{1}\bar{1}$ -2. Die folgende Tab. 13 listet die direkt aus den Sektionstopogrammen gewonnenen Verschiebungswerte sowohl für den $\bar{1}\bar{2}$ - als auch für den $\bar{1}\bar{1}$ -2-Reflex.

	V1 t1	V1 t2	V2 t1	V2 t2	V3 t1	V3 t2
Δ_1^- [mm]	0.016	-0.024	-0.032	-0.016	-0.032	-0.024
Δ_1^+ [mm]	-0.050	-0.011	-0.032	-0.048	-0.048	-0.095
Δ_3^- [mm]	0.207	0.254	0.095	0.175	0.032	0.111
Δ_3^+ [mm]	0.239	0.270	0.103	0.167	0.024	0.119

Tabelle 13. Versetzungskontrastbewegung im Vergleich zweier Reflexe

Wenn es sich nun um kinematische Kontraste handelte, so würde in beiden Fällen derselbe Punkt der Versetzung, nämlich der Schnittpunkt der Versetzung mit dem durch den Spalt ausgeblendeten direkten Röntgenstrahl, abgebildet werden. Mit anderen Worten, eine Rückrechnung der Werte von Tab. 13 müsste für beide Reflexe zum selben Ausgangspunkt im Kristall zurückführen. Betrachtet man nun Formel (22) dieses Kapitels, so wird unter Beachtung daß :

- $\Delta_3^+ \approx \Delta_3^-$, sowie
- $\cot \bar{\sigma}^- > 0$ und $\cot \bar{\sigma}^+ < 0$ (nach Tab. 9 (S.94))

deutlich, daß $\Delta x(t)^- = \Delta x(t)^+$ nur möglich ist, wenn $\Delta_1^+ > \Delta_1^-$ ist. Dies ist jedoch bei den Tabellenwerten mit Ausnahme eines Wertes nie erfüllt.¹²⁵ Das bedeutet : in fast allen Fällen kann es sich nicht um kinematische Kontraste handeln !

¹²⁵ Gleiches gilt für die meisten sonstigen ausgewerteten Sektionstopogramme.

Dieses Ergebnis kann man qualitativ auch beim direkten Vergleich zweier Sektionstopogramme ersehen, wie die nachfolgende Abbildung 114 zeigt.

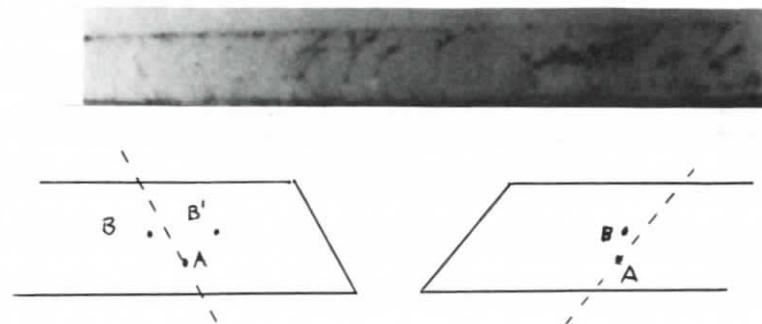


Abbildung 114. Kinematische Kontrastbewegung in zwei Sektionstopogrammen: Das Topogramm zeigt den Stereoreflex $\bar{1}\bar{1}$ -2 zu Abbildung 113 auf Seite 132. Die eingezeichnete Konstellation in der darunterliegenden Zeichnung entspricht der von Versetzung 3. Wenn sich diese Versetzung im rechten Sektionstopogramm in der gezeichneten Weise vom Punkt A zum Punkt B bewegt, so erfolgt diese Bewegung im Vergleich zur seitlichen Kante des Sektionstopogrammes (angedeutet durch den Strich) mit einer zusätzlichen Komponente nach "links". Betrachtet man nun das linke Sektionstopogramm, so müsste die Bewegung relativ zu dessen seitlicher Kante ebenfalls eine zusätzliche Komponente nach "links" haben und in etwa zum Punkt B führen. Der tatsächlich beobachtete Zielpunkt liegt jedoch beim Punkt B', der eine zusätzliche Komponente nach "rechts" ausweist. B und B' können also unmöglich vom selben Ausgangspunkt im Kristall herrühren.

9.2.3 Erklärungsansatz durch Strahlumlenkung

Das Problem der Interpretation des auftretenden Röntgenkontrastes liegt darin, daß außer den diskutierten und aus verschiedenen Gründen verworfenen kinematischen, dynamischen und intermediären Kontrasten in der Literatur keine anderen Abbildungsmöglichkeiten genannt werden, die

auch nur annähernd die experimentell gefundenen Bilder erklären würden. Bei der Suche nach einer Erklärung stellte sich die folgende Theorie als zumindest qualitativ in die richtige Richtung führend dar.

9.2.3.1 Darstellung der Strahlweges

Man nehme an, daß ein Teil der Hauptstrahlintensität, der nach der dynamischen Theorie vom Eintritt in den Kristall bis zum Auftreffen auf die Versetzung in 000-Richtung weiterläuft, durch die durch die akustische Welle hervorgerufene Gitterverzerrung nicht in dieser Richtung weiterläuft, sondern bereits an der Vorderseite in Richtung des hkl-Reflexes reflektiert werde (vergleiche hierzu Abbildung 115). Trifft dieser Strahl nun auf die Versetzung, so laufe ein Teil der Intensität von diesem Punkt bis zum Kristallende in 000-Richtung und hinter dem Kristall erst wieder in hkl-Richtung.

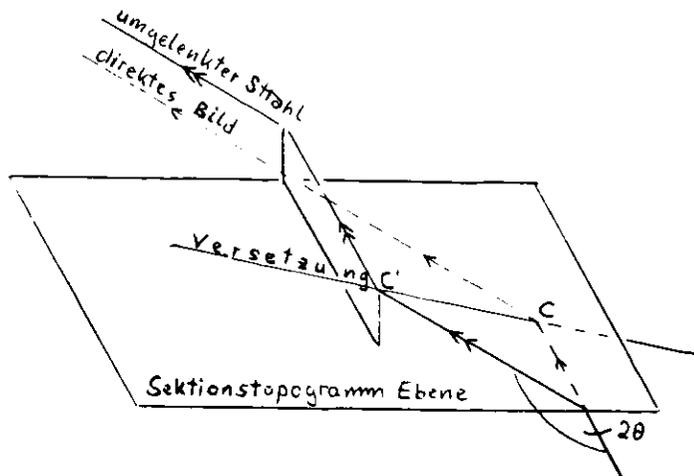


Abbildung 115. Darstellung des umgelenkten Strahlweges: Durchgezogener Strahlweg : umgelenkter Strahl; gestrichelter Strahlweg : nach kinematischer Theorie.

9.2.3.2 Herleitung der Bewegungsberechnung bei Strahlumlenkung

Der folgenden Herleitung liegt die Idee zugrunde, die bisher abgeleiteten Formeln zwischen Kristall- und Topogramm-Koordinaten weiter zu nutzen. Insofern werden anstelle der Koordinaten des Kontrastquellpunktes zum umgelenkten Strahl die Koordinate desjenigen (scheinbaren) kinematischen Kontrastquellpunktes¹²⁶ berechnet, der zum selben Punkt im Topogramm führt. Als Koordinatenursprung wird wie bisher der Durchstoßungspunkt der Versetzung durch die Rückseite des Kristalles A gewählt.

Vertikalkomponente

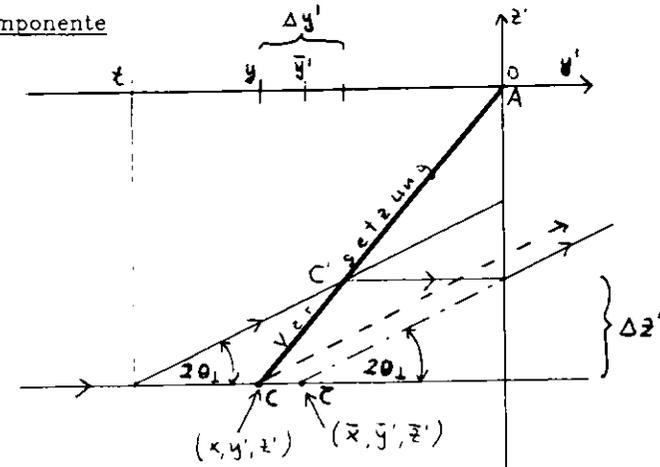


Abbildung 116. Darstellung des umgelenkten Strahlweges : Vertikalkomponente: \overline{AC} = Versetzungslinie;

- durchgezogener Strahlweg mit C' = Kontrastquellpunkt des umgelenkten Strahles;
- gestrichelter Strahlweg : nach kinematischer Theorie mit $C = (x, y', z')$ = kinematischer Kontrastquellpunkt ($\hat{=}$ Ruhelage);
- strichpunktierte Linie : Rückverlängerung des umgelenkten Strahlweges bis in die Sektionstopogrammebene mit $\overline{C} = (\overline{x}, \overline{y}', \overline{z}')$ = scheinbarer kinematischer Strahlausgangspunkt.

¹²⁶ entspricht dem in Tab. 12 (S.133) berechneten Punkt

Gesucht wird die Abhängigkeit der Koordinaten $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}')$ von den bekannten Koordinaten (x, y', z') . Nach der vorstehenden Abbildung 116 gilt¹²⁷:

$$(28) \quad \Delta z' / \Delta y' = z' / y'$$

$$(29) \quad \tan 2\theta_{\perp} = \Delta z' / \left(- (t - y') + \Delta y' \right)$$

Aus diesen Gleichungen folgt:

$$(30) \quad \Delta z' = (t - y') / \left(y' / z' - \cot 2\theta_{\perp} \right)$$

Für den Punkt C' gilt:

$$(31) \quad \tan 2\theta_{\perp} = \Delta z' / -\bar{y}'$$

so daß die Auflösung nach \bar{y}' ergibt:

$$(32) \quad \bar{y}' = z' \cdot (y' - t) / \left(y' \cdot \tan 2\theta_{\perp} - z' \right)$$

Sinngemäße Übertragung von Formel (23) des Abschnittes "Charakteristische Auslenkung" auf Seite 129 ergibt für die Kontrastverschiebung im Sektionstopogramm:

$$(33) \quad \Delta_3 = y' \cdot \tan 2\theta_{\perp} - z' \cdot (y' - t) / \left(y' - z' \cdot \cot 2\theta_{\perp} \right)$$

unter Beachtung, daß $\Delta z', \Delta y', \theta_{\perp} > 0$, $z', y', t < 0$ und $\Delta z' < -z'$ (sonst keine Umlenkung möglich).

Horizontalkomponente

In analoger Weise folgt aus:

$$(34) \quad \Delta x / \Delta z' = x / z'$$

und

$$(35) \quad \tan \sigma = -\Delta z' / (x + \Delta x - \bar{x})$$

die Gleichung

¹²⁷ Bei allen in dieser Ableitung vorkommenden Größen handelt es sich um Werte im schwingenden Quarz; die Tilde " ~ " wurde jedoch der Übersichtlichkeit halber fortgelassen.

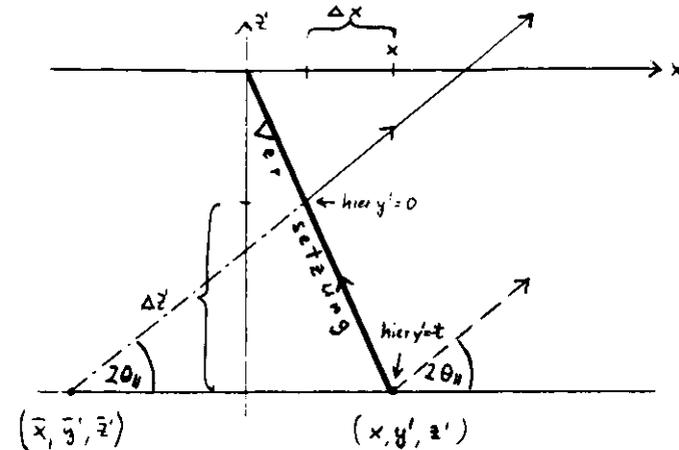


Abbildung 117. Darstellung des umgelenkten Strahlweges: Horizontalkomponente: Bezeichnungen wie in Abbildung 116 auf Seite 138.

$$(36) \quad \bar{x} = x + \Delta z' \cdot \left(x / z' + \cot \sigma \right)$$

Mit Gleichung (30) ergibt sich also:

$$(37) \quad \bar{x} = x + \left((t - y') \cdot (x + z' \cdot \cot \sigma) \right) / \left(y' - z' \cdot \cot 2\theta_{\perp} \right)$$

Damit folgt für die Horizontalkomponente der Kontrastverschiebung:

$$(38) \quad \Delta_1 = y' \cdot \tan 2\theta_{\perp} - x \cdot (y' - t) / \left(y' - z' \cdot \cot 2\theta_{\perp} \right)$$

unter Beachtung, daß $\theta_{\perp}^+, \theta_{\perp} > 0$, $z', y', t < 0$

9.2.3.3 Die "Bewegung" dreier ausgewählter Versetzungen

Das im Anhang unter "Programm DISLREST" auf Seite 147 zu findende Programm DISLREST wurde so erweitert, daß es nach den eben hergeleiteten Formeln (33) und (38) die Kontrastverschiebung bei einer Strahlumlenkung errechnet. Für die drei untersuchten Versetzungen ergeben sich hiernach die Werte¹²⁸, die zusammen mit den experimentell gemessenen Daten in der nachfolgenden Tabelle angegeben sind.

	V1	V1	V2	V2	V3	V3
	t1	t2	t1	t2	t1	t2
Exp. Δ_1^- [mm]	0.016	-0.024	-0.032	-0.016	-0.032	-0.024
Theo. Δ_1^- [mm]	0.032	0.032	0.058	0.058	0.061	0.061
Theo. Δ_1^{--} [mm]	0.029	0.029	0.052	0.052	0.055	0.055
Exp. Δ_1^+ [mm]	-0.050	-0.011	-0.032	-0.048	-0.048	-0.095
Theo. Δ_1^+ [mm]	-0.105	-0.105	-0.204	-0.204	-0.252	-0.252
Theo. Δ_1^{++} [mm]	-0.104	-0.104	-0.190	-0.190	-0.245	-0.245
Exp. Δ_3^- [mm]	0.207	0.254	0.095	0.175	0.032	0.111
Theo. Δ_3^- [mm]	0.330	0.330	0.165	0.165	0.083	0.083
Theo. Δ_3^{--} [mm]	0.332	0.332	0.155	0.155	0.081	0.081
Exp. Δ_3^+ [mm]	0.239	0.270	0.103	0.167	0.024	0.119
Theo. Δ_3^+ [mm]	0.320	0.320	0.159	0.159	0.079	0.079
Theo. Δ_3^{++} [mm]	0.318	0.318	0.169	0.169	0.082	0.082

Tabelle 14. Kontrastverschiebung bei umgelenktem Strahl / experimentelle Daten

9.2.4 Diskussion der Bewegungsergebnisse

Schon die sehr vereinfachte Annahme der Strahlumlenkung ergibt eine deutlich bessere Näherung der experimentell gewonnenen Daten. Einige Anmerkungen sollen im folgenden zusammengetragen werden:

- Insbesondere die Vertikalkomponente der Sektionstopogramm - Kontraständerung wird bereits in guter Näherung wiedergegeben. Dies ist umso wichtiger, als es diese Komponente war, die die hohen Geschwindigkeiten hervorrief.

¹²⁸ Werte mit Index " + " (respekt. " - ") betreffen die Kontrastverschiebung im Plus- (respekt. Minus-) Reflex bezogen auf die zwischen Plus- und Minusreflex bereits gemittelte Ruheposition, Werte mit dem Index " ++ " (respekt. " -- ") beziehen sich auf die allein aus dem Plus- (respekt. Minus-) Reflex ermittelte Ruheposition.

- Größere Abweichungen finden sich in Horizontalkomponente, und zwar sind die theoretischen Werte im Falle des Minusreflexes zu groß, im Falle des Plusreflexes zu klein. Möglicherweise handelt es sich um eine systematische Abweichung, worauf die Tatsache hinweist, daß die Verschiebungen im Vergleich der drei Versetzungen sowohl bei den experimentellen, als auch bei den theoretischen Daten im gleichen Sinne von V1 nach V3 zu- (im Minus-Reflex) bzw. abnehmen (im Plus-Reflex).
- Besonders gut geeignet ist das Modell zur Erklärung der experimentell gefundenen Tatsache, daß sich die Versetzung der oberen Hälfte des Sektionstopogrammes nach unten, diejenigen der unteren Hälfte jedoch nach oben bewegen. Dies wird sofort deutlich, wenn man sich entsprechende Punkte C in Abbildung 116 auf Seite 138 einzeichnet.
- Ebenfalls erklärt wäre das Verhalten, daß die Versetzungen in beiden Halbwellen in dieselbe Richtung laufen. Die Aussage der einfachen Umlenkungsannahme, daß sich die Kontraste in beiden Halbwellen der akustischen Schwingung in exakt derselben Weise bewegen, ist sicherlich eine zu grobe Annahme und wird auch schon durch die experimentellen Daten widerlegt.
- Eine Aufspaltung in zwei Teilkontraste, wie sie im Experiment häufig auftreten, läßt sich ohne weiteres durch eine sehr plausible Annahme erklären: Es wird nicht die gesamte Intensität bereits an der Vorderseite des Kristalles umgelenkt, sondern ein Teil geht weiterhin den herkömmlichen "kinematischen Weg".

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß bereits die sehr einfache Annahme einer Intensitätsumlenkung das Verhalten der Versetzungskontraste in den Topogrammen qualitativ in vielerlei Hinsicht richtig voraussagen kann, und daß auch die quantitative Bewegung der drei untersuchten Versetzungen sehr viel besser genähert werden kann, als wenn man das herkömmliche kinematische Bild zugrunde legte.

9.3 FOLGERUNGEN FÜR WEITERE EXPERIMENTE

Die Methode der stroboskopische Röntgentopographie hat extreme Versetzungskontraständerungen für den Fall eines schwingenden Quarzes sichtbar gemacht. Diese können mit der kinematischen Theorie nicht erklärt werden und in der Literatur gibt es meines Wissens keinen Hinweis, daß derartige Phänomene beobachtet, geschweige denn mittels der dynamischen Theorie erklärt wurden.

Die einfache Annahme eines Intensitätsumlenkungsvorganges deutet in eine mögliche Lösungsrichtung. Die auftretenden Differenzen zwischen theoretischen und experimentellen Ergebnissen lassen sich grundsätzlich auf zweierlei Weise erklären :

- Entweder die Annahme der eindeutigen Intensitätsumlenkung ist zu einfach und muß beispielsweise als abhängig von Höhe und Richtung der akustischen Welle angesehen werden,
- oder der Intensitätsumlenkung muß noch die tatsächliche Bewegung der Versetzung überlagert werden.

Nicht unwahrscheinlich ist freilich eine Kombination dieser beiden Modifikationen. Mit dem jetzigen Kenntnisstand kann keine der beiden Möglichkeiten ausgeschlossen werden.

Als erfolgversprechender Weg bietet sich die Simulation des Versetzungskontrastes auf dem Computer an. Sektionstopogramm - Kontrast - Simulationen auf der Basis der Takagi-Taupin-Gleichungen¹²⁹, wie sie von Epelboin et al. durchgeführt wurden, müßten auf eine sinusförmige Gitterverzerrung hin erweitert werden.

Experimentell sollten diese Rechnungen in zweierlei Hinsicht unterstützt werden. Einerseits sollten die Sektionstopogramme bewußt auf die Abbildung dynamischer Kontraste hin erstellt werden, d.h. es muß ein schmalerer Spalt ($\approx 20 \mu\text{m}$) verwendet und die Filme entsprechend länger belichtet werden; zum zweiten sollte die Aufnahmegeometrie so verändert werden, daß man nicht nur einen Schnittpunkt der Versetzung erhält, sondern daß sie gerade in der vom Eingangsspalt beleuchteten Ebene liegt, so daß das Verhalten längs eines großen Abschnittes der Versetzung sichtbar wird.

¹²⁹ siehe z.B. Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976 S. 79

Läßt sich bei diesen Untersuchungen eine sinusförmige Gitterverzerrung als physikalische Ursache der Kontrastbewegung ausschließen, so ist die Frage zu prüfen, ob die auftretenden Nebenmoden die Ursache sind. Hierzu wäre es sinnvoll, anders geschnittene Quarze zu verwenden; von der Herstellerseite böten sich planparallele AT- und auch Y-Schnitt-Quarze an. Auch die Wahl rechteckiger Quarzplättchen empfiehlt sich, da die nötigen Rechnungen von den Randbedingungen her vereinfacht würden, und man auf die bekannte Theorie der Nebenmoden von Mindlin (siehe Abschnitt "Die Nebenmoden" auf Seite 55) zurückgreifen könnte.

Eine sorgfältige Durchführung dieser Versuche sollte die Frage klären können, ob sich die Versetzungen tatsächlich bewegen und ob die bis dato entwickelten Theorien für die zu überwindenden Bindungsenergiebarrieren sich als tragfähig erweisen.

A.0 PROGRAMM DISLREST

```

F41GLU.QUARZ.S(DISLREST)          DATE: 26/08/82 TIME: 18:24:03
//F41GLU JOB 10000241,F41GLU,CLASS=E,MSGLEVEL=(0,0)
//MAIN,RELPR1=HIGH
//EXEC GEP,FORT='XREF',DN='F41GLU DISRED7S'
//COMP.SYSIN DD *
C 01/07/82 MEMBER NAME DISLREST(S) FORTRAN
REAL PI/3,141593/,X, XM, XP, YS, YSM, YSP, ZS, ZSP, ZSM, WINSIN, WINCOS,
*AB, OR, C1P, C2P, C3P, C1M, C2M, C3M, CSIGP, CGTHUP, CSIGM,
*CGTHUM, YSMAX, XUC(10), ZSUC(10), M, XUP(10), XUM(10), ZSUP(10), ZSUM(10),
*XP, XM, ZSP, ZSM, MM
INTEGER N, KA, UI, TOPONR, UIMAX, J
COMMON/GEPCO/NROW, NCOL, NF, NL, ZADDC, DZADDC, NKA, NKB, NKC, NVAL,
*AWX, BHX, AWY, BHY
C CALL GEPICU
PROJEKTIONSWAHL
WINCOS=COS(8.8*PI/18)
WINSIN=SIN(8.8*PI/18)
C ANZAHL DER ZU BERECHNENDEN UERSETZUNGEN (MAX 10)
C READ(10,1001)UIMAX
FORMAT(I3//)
C EINLESEN VON KRISTALLDICKE, SIGMAWINKELN UND THETASENRECHTWINDELN
C READ(10,1002)YSMAX, CSIGP, CSIGM, CGTHUP, CGTHUM
FORMAT(SF8.4//)
C BERECHNUNG DER UERSETZUNGSURSPRUNGE
C URSPRUNG DER ERSTEN UERSETZUNG
C TOPONR=0
READ(10,1003)XUC(1), ZSUC(1)
FORMAT(2F8.4//)
1003 UI=1
KA=UI
READ(10,1006)XUP(1), ZSUP(1), XUM(1), ZSUM(1)
FORMAT(4F8.4//)
C URSPRUNG DER 1. UERS. BEZGL. AUSWERTEPUNKT P BZW. M
XUP(1)=XUP(1)*0.0159
ZSUP(1)=ZSUP(1)*0.0159
XUM(1)=XUM(1)*0.0159
ZSUM(1)=ZSUM(1)*0.0159
C ZIFFERN AUSGABE URSPRUNG UERS.1 IM GESAMT-KOORD. SYST.
C WRITE(6,2001)XUC(1), YSMAX, ZSUC(1)
FORMAT(' URSPRUNG VON UERSETZUNG 1:',3F8.4)
2001 GRAPHISCHE AUSGABE
C AB=-XUC(1)+WINCOS*ZSUC(1)
OR=ZSUC(1)*WINSIN+.333
C EBENE IN HOEHE .333 WEGEN DICKENVARIATION DES QUARZES
CALL GEND(KA,100,AB,OR)
KA=KA+10
OR=OR+YSMAX-.333
C RAUM

```

```

CALL GEND(KA,100,AB,OR)
KA=KA-10
C C C C
NUN DIE UEBRIGEN UERSETZUNGEN
C DO 100 UI=2,UIMAX
KA=UI
C ZUERST EINLESEN VON DEREN URSPRUENGEN GEMESSEN RELATIV
ZUM AUSWERTEPUNKT P BZW. M IN SKT.
C READ(10,1004)XP, ZSP, XM, ZSM
1004 FORMAT(4F8.4)
C BERECHNUNG DER URSPRUNGE BEZGL. P UND M IN MM
XUP(UI)=XP*0.0159
ZSUP(UI)=ZSP*0.0159
XUM(UI)=XM*0.0159
ZSUM(UI)=ZSM*0.0159
C BERECHNUNG DER URSPRUNGE IN BEZUG AUF DAS GESAMT-KOORD.SYST.
XUC(UI)=XUC(1)+0.5*(XUP(UI)+XUM(UI)-XUP(1)-XUM(1))
ZSUC(UI)=ZSUC(1)+0.5*(ZSUP(UI)+ZSUM(UI)-ZSUP(1)-ZSUM(1))
C ZIFFERN-AUSGABE DER UERSETZUNGSURSPRUNGE
C WRITE(6,2002)UI, XUC(UI), YSMAX, ZSUC(UI)
2002 FORMAT(' URSPRUNG VON UERSETZUNG ',I3,', ',3F8.4)
C GRAPHISCHE AUSGABE
C AB=-XUC(UI)+WINCOS*ZSUC(UI)
OR=ZSUC(UI)*WINSIN+.333
C EBENE
CALL GEND(KA,100,AB,OR)
KA=KA+10
OR=OR+YSMAX-.333
C RAUM
CALL GEND(KA,100,AB,OR)
KA=KA-10
100 CONTINUE
C C C C C C
NUN FOLGT DIE BERECHNUNG DER UEBRIGEN PUNKTE
C AEUSSERE SCHLEIFE : DIE TOPOGRAMME
C READ(10,1007)
1007 FORMAT(1X//)
TOPONR=TOPONR+1
UI=0
C C C C C C
INNERE SCHLEIFE : DIE UERSETZUNGEN
C READ(10,1005,END=999)C1P, C2P, C3P, C1M, C2M, C3M
1005 FORMAT('1',6F8.4)
C ABFRAGE OB FUER DIESE UERSETZUNG UEBERHAUPT DATEN ANGEBOETEN
WERDEN; WENN NICHT, STEHT IM DATENFELD 0.001
UI=UI+1
KA=UI
C IF((ABS(C1P)).LT.(0.002)) GO TO 2
C UERECHNUNG SKT IN MM

```


B.0 PROGRAMM FORMFAKT

```

DST 106 'X-ACHSE FUER Z' = 0, Y' = 0.333
DST 107 'X-ACHSE FUER Z' = 0, Y' = 1.989
ENDQ
//GO.FT10F001 DD *
3 ANZAHL DER ZU BERECHNENDEN VERSETZUNGEN
C EINLESEN VON KRISTALLDICKE YSMAX, DOT SIGMA PLUS, DOT SIGMA MINUS,
C DOT G THETA VERT. PLUS, DOT G THETA VERT. MINUS ; FORMAT 5F8.4
1.989 -0.3057 0.4245 3.891 3.788
C EINLESEN DES URSPRUNGS VON VERSETZUNG NR 1 XUC(1), ZSUC(1) IM WILL-
C KUERLICH ZU WAHLENDEN GESAMTKOORD SYST. IN MM ! FORMAT 2F8.4
-0.6 2.2
C EINLESEN DES URSPRUNGS VON VERS.1 BZGL. AUSWERTEPUNKT P ( XUP(1),
C ZSUP(1) ) UND H ( XUM(1), ZSUM(1) ) IN SKT. ! FORMAT 4F8.4
-3.0 21.0 -3.0 39.0
C EINLESEN DER URSPRUNGE DER UEBRIGEN VERSETZUNGEN BZGL. DER
C AUSWERTEPUNKTE P ( XP, ZSP ) UND H ( XM, ZSM ) IN SKT. ! FORMAT 4F8.4
C PRO ZEILE EINE VERSETZUNG
-16.0 35.0 -16.0 53.0 TOPO IV 71 E
-37.0 47.0 -38.0 65.0 TOPO IV 71 G + E
C NUN EINLESEN DER UEBRIGEN PUNKTE JEWEILS BZGL. P ODER H
C IN EINER ZEILE : C1P,C2P,C3P,C1M,C2M,C3M FORMAT 6F8.4
C ZEILENREIHENFOLGE : Z.1:TOPO1 U1, Z.2:TOPO1 U2, Z.N:TOPO1:UN,
C Z.N+1:TOPO2 U1, Z.N+2:TOPO2 U2 USW
-1.5 2.0 14.0 -1.0 2.0 36.0 TOPO IV 71 A
-9.0 5.0 17.0 -11.0 5.0 39.0
-22.0 7.0 19.0 -26.0 7.5 41.5
1.0 4.0 -2.0 -1.0 4.0 15.0
-1.0 8.0 2.0 -7.0 8.5 19.0 TOPO IV 70 C
-12.0 11.0 5.0 -19.5 11.0 21.0
4.0 6.0 -18.0 0.0 6.0 0.0
2.0 11.0 -12.0 -2.0 12.0 6.0 TOPO IV 68 H
-5.0 13.5 -9.0 -12.0 14.0 8.0
5.0 8.0 -35.0 1.0 8.0 -16.0
12.0 15.0 -28.0 2.0 15.0 -9.0 TOPO IV 69 E
5.0 16.0 -27.0 -5.5 16.5 -7.5
9.0 12.0 -69.0 3.0 13.0 -51.0
26.0 20.0 -58.0 11.0 23.0 -41.0 TOPO IV 68 H
25.0 21.0 -58.0 9.0 24.0 -40.0
0.001
34.0 26.0 -75.0 14.0 27.5 -59.0 ENDPUNKTE
35.0 26.0 -75.0 17.0 27.5 -59.0 TOPO IV 68 D PROJ.TOP.

```

```

0000300
0000400
0000500

```

```

F41GLU.QUARZ.S(FORMFAKT) DATE: 30/08/82 TIME: 13:17:26
C 16/07/82 208301316 MEMBER NAME FORMFAKT (S) FORTRAN 00000000
C PROGRAMM ZUR INTERAKTIIVEN BERECHNUNG VON 00001000
C STREU- UND ABSORPTIONSDATEN VON ALPHA-QUARZ 00002000
C 00003000
C U E R S I O N 6 INCL DIELELSUSZEPTIBILITAET 00004000
C INCL 003 - REFLEX 00005000
C INCL EXTINKTIONSLAENGE 00006000
C INCL REFLEKTIONSBREITE 00007000
C INCL LIN ABSORPTIONSKOEFFIZIENT 00008000
C 00009000
C INTEGER H,K,L,I,J,P 00010000
C REAL D,DD,FI,FR,FF,AC,ASI,A.PI2/6 283186/,GTH,LAMBDA, 00011000
C *KLASIC,KLAOC,KLAKIS,KLAOS,CHSTR,CHSTSI,CHSTPR,CHSTPI,TAUC,4,5, 00012000
C *MYSIG0,MYSIGS,MYPI0,MYPI5,CHABSR,CHABSI,CHABPR,CHABPI 00013000
C *CHISIR,CHISII,CHIPIR,CHIPII,LAMC,4),GTHB,FAKT,CHSTR0,CHABSO, 00014000
C *GAMMA,PF1,PF2,GAM0,GAMH,GAMI,CHISIR,CHISII,CHIPIR,CHIPII, 00015000
C *CHIBS,EXTSI,REFBRS,CHIBP,EXTP1,REFBRP,MYO 00016000
C 00017000
C 00018000
C ANFORDERN DER EINGABEDATEN 00019000
C 00020000
111 WRITE(6,1000) 00021000
1000 FORMAT('///// PROGRAMM ZUR INTERAKTIIVEN BERECHNUNG/' 00022000
C ' VON STREU- UND ABSORPTIONSDATEN VON', 00023000
C ' ALPHA-QUARZ F O R M F A K T /' 00024000
C ' GIB EIN IM FORMAT 3I2 : H K L DES GEWUNSCHTEN REFLEXES !/' 00025000
C ' PROGRAMMBEENDIGUNG DURCH EINGABE VON /* )' 00026000
READ(5,2000,END=99)H,K,L 00027000
2000 FORMAT(3I2) 00028000
WRITE(6,1006) 00029000
1006 FORMAT(' GIB EIN IM FORMAT F8.4 : BRAGGWINKEL IN GRAD /' 00030000
C ' WENN NICHT BEKANNT, GIB EINEN NEGATIVEN WERT EIN. /' 00031000
C ' DANN IST ABER NUR BERECHNUNG 00032000
C ' DES STREUANTEILS DES STRUKTURFAKTORS MOEGLICH )' 00033000
READ(5,2002)GTH 00034000
2002 FORMAT(F8.4) 00035000
IF(GTH.LT.0.000) GO TO 112 00036000
WRITE(6,1016) 00037000
1016 FORMAT(' GIB EIN IM FORMAT F8.4 : /' 00038000
C ' WINKEL ZWISCHEN EINFALLENDEN STRAHL UND OBERFLAECHENNORMALER /' 00039000
C ' DER KRISTALLVORDERSEITE IN GRAD ///' 00040000
READ(5,2002)GAM1 00041000
C 00042000
C 00043000
C BERECHNUNG DES NETZEBENENABSTANDES D 00044000
C 00045000
112 D=SQRT(1/((H**2+K**2+L**2)*S.523E18+L**2*3.4228E18)) 00046000
DD=(1E-10)/L**2*DD 00047000
IF((DD.LT.0.25) OR (.DD.GT.0.35)) GO TO 98 00048000
C 00049000
C 00050000
C BERECHNUNG DER ATOMFORMFAKTOREN FUER SAUERSTOFF (AO) 00051000
C UND SILIZIUM (ASI) DURCH INTERPOLATION VON TABELLENWERTEN 00052000
C 00053000
C A=DD-0.3 00054000
IF(A) 201,201,202 00055000
201 AO=4.094-14.4*A 00056000
ASI=8.22-12.6*A 00057000
GO TO 203 00058000
202 AO=4.094-12.08*A 00059000

```



```

C      FAKT=(1.4083E27)*LAMBDA      00018800
C      FUER SIGMA POLARISATION GILT : 00018900
C      CHABR IST REALTEIL DES ABS. ANTEILS DER DIEL. SUSZ 00019000
C      CHABSR=FAKT*(MYSIG0*KLAC0+MYSIGS*KLASIC) 00019100
C      CHABSI IST IMAGINAERTEIL DES ABS. ANTEILS DER DIEL. SUSZ. 00019200
C      CHABSI=FAKT*(MYSIG0*KLAS0+MYSIGS*KLASIS) 00019300
C      FUER PI POLARISATION GILT : 00019400
C      CHABPR IST REALTEIL DES ABS. ANTEILS DER DIEL. SUSZ. 00019500
C      CHABPR=FAKT*(MYPID0*KLAC0+MYPIS*KLASIC) 00019600
C      CHABPI IST IMAGINAERTEIL DES ABS. ANTEILS DER DIEL. SUSZ 00019700
C      CHABPI=FAKT*(MYPID0*KLAS0+MYPIS*KLASIS) 00019800
C      AUSDRUCK DES ABSORPTIONSANTEILS DER DIEL. SUSZ. 00019900
C      WRITE(6,1009)CHABSR,CHABSI,CHABPR,CHABPI 00020000
1009  FORMAT(' ABSORPTIONSANTEIL : ' 00020100
C      * ' BEI SIGMA-POLARISATION : ' 00020200
C      * ' CHIABSSIG = ' 00020300
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3/' BEI PI-POLARISATION : ' 00020400
C      * ' CHIABSPI = ' 00020500
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3/' 00020600
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00020700
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00020800
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00020900
C      * ' CHI0 = ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00021000
C      NUN AUSDRUCK VON STREU- UND ABSORPTIONSANTEIL DES 00021100
C      ZUGEHORIGEN -H-K-L REFLEXES, 00021200
C      IST JEWEILS KONJUGIERT KOMPLEX ZUM H-K-L-REFLEX 00021300
C      CHSTSI=-CHSTSI 00021400
C      CHSTPI=-CHSTPI 00021500
C      CHABSI=-CHABSI 00021600
C      CHABPI=-CHABPI 00021700
C      WRITE(6,1124)CHSTSR,CHSTSI,CHSTPR,CHSTPI, 00021800
C      *CHABSR,CHABSI,CHABPR,CHABPI 00021900
1124  FORMAT(' FUER DIE ZUGEHORIGE -H-K-L -KOMponente ERGIBT SICH :// 00022000
C      * ' STREUANTEIL'// BEI SIGMA-POLARISATION : ' 00022100
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3/' 00022200
C      * ' BEI PI-POLARISATION : ' 00022300
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3/' 00022400
C      * ' ABSORPTIONSANTEIL'// 00022500
C      * ' BEI SIGMA-POLARISATION : ' 00022600
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3/' BEI PI-POLARISATION : ' 00022700
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00022800
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00022900
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00023000
C      NUN BERECHN. + AUSDRUCK DER DIEL. SUSZ 00023100
C      FUER BEIDE POLARISATIONSFALLE 00023200
C      H-K-L -/ -H-K-L / UND 000 00023300
C      CHISIR= REALTEIL DER DIEL. SUSZ BEI SIGMA-POL. 00023400
C      CHISII= IMAGINAERTEIL DER DIEL. SUSZ. BEI SIGMA-POL. 00023500
C      CHIPIR= REALTEIL DER DIEL. SUSZ BEI PI-POL. 00023600
C      CHIPII= IMAGINAERTEIL DER DIEL. SUSZ BEI PI-POL. 00023700
C      BEACHTUNG, DASS IMAGINAERTEILE AUF -H-K-L -WERTE GESETZT 00023800
C      CHISIR=CHSTSR+CHABSI 00023900
C      CHISII=CHSTSI+CHABSR 00024000
C      CHIPIR=CHSTPR+CHABPI 00024100
C      CHIPII=CHSTPI+CHABPR 00024200
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024300
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024400
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024500
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024600
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024700
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024800
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00024900
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00025000
C      * ' E12.3, ' + I * ' E12.3' 00025100

```

```

      CMPIR=CHSTPR-CHABPI      00025200
      CMPII=CHABPR+CHSTPI      00025300
      00025400
      00025500
      00025600
      00025700
      00025800
      00025900
      00026000
      00026100
      00026200
      00026300
      00026400
      00026500
      00026600
      00026700
      00026800
      00026900
      00027000
      00027100
      00027200
      00027300
      00027400
      00027500
      00027600
      00027700
      00027800
      00027900
      00028000
      00028100
      00028200
      00028300
      00028400
      00028500
      00028600
      00028700
      00028800
      00028900
      00029000
      00029100
      00029200
      00029300
      00029400
      00029500
      00029600
      00029700
      00029800
      00029900
      00030000
      00030100
      00030200
      00030300
      00030400
      00030500
      00030600
      00030700
      00030800
      00030900
      00031000
      00031100
      00031200
      00031300
      00031400
      00031500
      00031600
      00031700
      00031800
      00031900
      00032000
      00032100
      00032200
      00032300
      00032400
      00032500
      00032600
      00032700
      00032800
      00032900
      00033000
      00033100
      00033200
      00033300
      00033400
      00033500
      00033600
      00033700
      00033800
      00033900
      00034000
      00034100
      00034200
      00034300
      00034400
      00034500
      00034600
      00034700
      00034800
      00034900
      00035000
      00035100
      00035200
      00035300
      00035400
      00035500
      00035600
      00035700
      00035800
      00035900
      00036000
      00036100
      00036200
      00036300
      00036400
      00036500
      00036600
      00036700
      00036800
      00036900
      00037000
      00037100
      00037200
      00037300
      00037400
      00037500
      00037600
      00037700
      00037800
      00037900
      00038000
      00038100
      00038200
      00038300
      00038400
      00038500
      00038600
      00038700
      00038800
      00038900
      00039000
      00039100
      00039200
      00039300
      00039400
      00039500
      00039600
      00039700
      00039800
      00039900
      00040000

```

LITERATURVERZEICHNIS

- zum Abschnitt "Röntgentopographie" auf Seite 1 :

Authier, A.: Section Topography, in X-Ray Optics, Queisser, H.J., (ed.) Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1977

Batterman, B.W., Cole, H., Reviews of modern physics, vol 36 no.3 p. 681 - 717 July 1964

Barrett, C.S., Trans. AIME 161, 15 (1945)

Berg, W.F., Naturwissenschaften 19, 391 (1931)

Bond, W.L., Andrus, J., Am. Mineralogist 37, 622 (1952)

Bonse, U., Kappler, E., Z. Naturforschung 13a, 348 (1958)

Bonse, U., Zeitschrift für Physik 177, 385-423 (1964)

Bonse, U., Hart, M., Newkirk, J.B. : X-ray diffraction, in Encyclopaedic Dictionary of Physics, Supplemetary Volume 1, Pergamon 1965

Epelboin, Y., Patel, J.R., J. Appl. Phys., vol. 53 no.1, p.271-75 (1982)

Fox, G.W., Carr, P.H., Physical Review, vol 37 p.1622 (1931)

Ibers, J.A., Hamilton, W.C., (eds.) International Tables for X-Ray Crystallography, Vol IV., Birmingham, Kynoch Press

Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1827-42 (1975)

Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 18, no.12p. 1785 ff. (1963)

Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 19, no.1p. 67 ff. (1964)

Kato, N., Journ. of the Phys. Soc. of Japan,vol 19, no.6p. 971 ff. (1964)

Kunz, C., (ed.) Synchrotron Radiation, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York 1979

Lang, A.R., Acta Cryst. 10, 839 (1957)

Lang, A.R., J. Appl. Phys. 29, 597 (1958)

Laue, M. v., Friedrich, W., Knipping, P., Ann. Physik 41, 971 (1913)

Takagi, S., Acta Cryst. 15, 1311 (1962)

Takagi, S., J. Phys. Soc. Japan 26, 1239 (1969)

Tanner, B.K., X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976

Tanner, B. et al., Proc. SRI Conf. 82, NIMPR (1982)

Tanner, B.K., Midgley, D., Safa, M., J. Appl. Cryst. 10, 281 - 86 (1977)

Taupin, D., Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist. 87, 469 (1964)

Tuomi, T., Naukkarinen, K., Rabe, P., Phys. Stat. Sol.(a) 25, 93 (1974)

- zum Abschnitt "Quarz" auf Seite 33 :

Barron, T.H.K. et al., J. Phys. C: Solid State Phys., Vol.9, S. 3925-3940 (1976)

Byrne, R.J., Lloyd, P., Spencer, W.J., J. Acoust. Soc. Am., vol.43, no.2, S. 232-38 (1968)

Cohen, A.J., Sumner, G.G., Amer. Min. 43, S.58-68 (1958)

Gagnepain, J.J., Besson, R., in Band 11 von Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press

Goodall, F.N., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1843-50 (1975)

Standards on Piezoelectric Crystals 1949, Proc. Inst. Radio Engrs, New York 37, 1378 (1949)

Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1827-42 (1975)

Kittel, Ch., Einführung in die Festkörperphysik, 5.Auflage, R. Oldenbourg Verlag 1980

Preuss, E. et al, Laue - Atlas, Bertelsmann Universitätsverlag 1975

Le Page, Y., Donnay, G., Acta Cryst. B32, S. 2456 (1976)

Mindlin, R.D., Spencer W.J., J. Acoust. Soc. Am. vol.42, no.6, S.1268 - 77 (1967)

Nicolas, A., Poirier, J.P., Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, John Wiley 1976

Tichy, J., Gautschi, G., Piezoelektrische Meßtechnik, Springer 1980

Trepied, L., Doukhan, J.-C., phys.stat.sol (a) 49, S.713-24 (1978)

Voigt, W., Lehrbuch der Kristall Physik, (1928)

• zum Abschnitt "Versetzungen" auf Seite 61 :

Authier, A.: Section Topography, in X-Ray Optics, Queisser, H.J., (ed.) Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1977

Baëta, R.D., Ashbee, K.H.G., Am. Mineral., 54: 1551 ff., 1574 ff. (1969)

Blacic, J.D., Tectonophysics, 27, S. 271 - 294 (1975)

Burgers, J.M., Proc. Kon. Ned. Akad. Wetenschap., 42 : 293, 378 (1939)

Darwin, C.G., Phil. Mag. 27: 315, 675 (1914)

Epelboin, Y., Patel, J.R., J. Appl. Phys., vol. 53 no.1. p.271-75 (1982)

Ewald, P.P., Ann. Phys., 54: 519 (1917)

Ewing, A., Rosenhain, W., Phil. Trans.Roy. Soc. A193,353(1899)

Foreman, A.J., Jaswon, M.A., Wood, J.K.Proc. Phys. Soc., 64A:156 (1951)

Frenkel, J., Z. Phys., 37: 572 (1926)

Frenkel, J., Kontorova T., Phys. Z. Sowj.,13: 1(1938)

Friedel, J., Dislocations, Pergamon, London 1964

Hirth, J.P., Lothe, J., Theory of dislocations, McGraw-Hill, New York 1968

Kosevich, A.M., Crystal dislocations and the theory of Elasticity, in Band 1 von Nabarro, F.R.N., (Hrsg.), Dislocations in Solids, North Holland Publishing Company, 1979/80

Maradudin, A., J. Phys. Chem. Solids, 9: 1 (1959)

Mügge, O.,Neues Jahrbuch Min., 13 (1883)

Nabarro, F.R.N., Proc. Phys. Soc., 59:256 (1947)

Nabarro, F.R.N., (Hrsg.), Dislocations in Solids, North Holland Publishing Company, 1979/80

Nicolas, A., Poirier, J.P., Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, John Wiley 1976

Orowan, E., Z. Phys., 89: 605, 634 (1934)

Peierls, R.E., Proc. Phys. Soc., 52:23 (1940)

Polanyi, M., Z. Phys., 89: 660 (1934)

Taylor, G.I., Proc. Roy. Soc., A145 : 362 (1934)

Tinder, R.F., Washburn, J., Acta Met., 12: 129 (1964)

Trepied, L., Journ. d. phys. Lettr. 39, L433 (1978)

Weißmantel, C.H., Hamann, C., Grundlagen der Festkörperphysik, Springer, Berlin, Heidelberg, NewYork 1979

• zum Abschnitt "Ergebnisse der Experimente" auf Seite 85 :

Bennett, A.L. et al, Applied Physics Letters vol 2 no 8 (1963)

Goodall, F.N., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1843-50 (1975)

Haruta, K., Journ. of Appl Physics, vol 38 no 8 p.3312 ff.(1967)

Isherwood, B.J., Wallace, C.A., J.Phys. D: Appl. Phys.,vol.8, S. 1827-42 (1975)

Mindlin, R.D., Spencer W.J., J. Acoust. Soc. Am. vol.42, no.6, S.1268 - 77 (1967)

Spencer, W.J., Hunt, R. M., Journ. of the Acost. Soc. of America, vol 39 no.5 pt.1 p.929 ff. (1966)

Spencer, W.J. in Physical Acoustics, Mason, W.P. (Hrsg.), Academic Press, vol.V 1968, p.111-161.

Tanner, B.K.,X-ray diffraction topography, Pergamon Press, Oxford 1976

Tanner, B. et al., Proc. SRI Conf. 82, NIMPR (1982)

Trepied, L., Doukhan, J.-C., phys.stat.sol.(a) 49, S.713-24 (1978)

Trepied, L., Doukhan, J.C., Journ. Mat. Science 13, 492 - 498 (1978)

Tuomi, T., Naukkarinen, K., Rabe, P., Phys. Stat. Sol.(a) 25, 93 (1974)

DANKSAGUNG

Zum Abschluß dieser Arbeit möchte ich noch die Gelegenheit ergreifen, all denen zu danken, deren Unterstützung mir im Lauf der letzten beiden Jahre eine wertvolle Hilfe war. Es beginnt bzw. es begann (um eine chronologische Reihenfolge zu wählen) mit Herrn Prof. Dr. C. Kunz, der mir das vorliegende Thema anvertraute, mir während der gesamten Zeit bei auftretenden Fragen hilfreich zur Seite stand und sich stets für meine Anliegen einsetzte. Die Hauptlast der Betreuung, der experimentellen Mithilfe und der Diskussion gewonnener Ergebnisse lag bei weitem bei Herrn Dr. Walter Graeff, bei dem ich mich für die hervorragende Zusammenarbeit in sehr angenehmem Arbeitsklima ganz herzlich bedanken möchte. Insbesondere bin ich froh, daß ich sicher sein konnte, für auftretende Probleme jederzeit ein offenes Ohr zu finden.

Gleich an dieser Stelle möchte ich erwähnen, daß es für mich sehr wichtig war, in einer ausgezeichneten Gruppenatmosphäre arbeiten zu können, wofür allen HASYLAB - Mitgliedern, insbesondere aber Sigrid Bernstorff, mein Dank gilt. Auch in fachlicher Hinsicht wurde ich gut unterstützt, so durch Aufdampfarbeiten für Probenhalter von Herrn Zeiger, bei den Experimenten durch die zeitweilige Mitarbeit von Herrn Dr. H. Möller und bei Computer- und artverwandten Fragen durch Dr. G. Sprüssel und O. Beimgraben. Außerhalb der Arbeitsgruppe danke ich insbesondere Herrn Dipl. Phys. N. Haken, der mir bei die Elektronik betreffenden Fragen hilfreich zur Seite stand.

Als es schließlich an die endgültige Fassung der Diplomarbeit ging, half Herr A. Henning beim Abziehen der Fotos und Frau I. Borchardt leitete mich sicher durch die Mysterien des Textverarbeitungsystems.

Ihnen allen und auch all denen, die unter den manchmal auftretenden recht arbeitsintensiven Tagen und Nächten gelitten haben, gebührt mein Dank.