

ELEKTRONENMIKROSKOPISCHE UNTERSUCHUNG DER
STRAHLenschÄDIGUNG IN IONENBESTRAHLTEN
KOBALT - EINKRISTALLEN

DIPLOMARBEIT VON HELMUT FÖLL

1973

UNIVERSITÄT STUTTGART
INSTITUT FÜR THEORETISCHE UND ANGEWANDTE PHYSIK
LEHRSTUHL FÜR FESTKÖRPERPHYSIK

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	4
2.1. Theorie der Elektronenbeugung; Kontrast- entstehung im Elektronenmikroskop	4
2.2. Kontrasttheorie	6
2.2.1. allgemeine Grundlagen	6
2.2.2. Kontrasttheorie für kleine Versetzungs- ringe	8
2.2.3. Orientierungsparameter p	14
2.2.4. Kontrastfiguren in den Schichten	16
2.2.5. Kontrastfiguren in den Zwischen- schichten	18
2.3. Allgemeine Eigenschaften der Kontrast- figuren	19
2.3.1. Abhängigkeit der Koeffizienten $a_1, a_3,$ b_1 und b_3 von den Winkeln φ und $\Delta\varphi$	19
2.3.2. Berechnung verschiedener KF. speziell für Kobalt	21
2.3.3. Einfluß der Querkontraktionszahl	22
2.3.4. Abhängigkeit der KF. von der z - Kom- ponente von $\underline{b}$ und $\underline{n}$	23
2.3.5. Einige Bemerkungen zu "Schmetterlingen"	25
2.3.6. Ersatz von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ durch einen mittler- en Orientierungsvektor $\underline{m}$	27
2.3.7. Verschwinden des Kontrasts	31
2.3.8. Schwarz - Weiß - Vektor $\underline{l}$	32
2.3.9. Berechnung von KF. in Zwischenschichten	33
3. Experimentelle Methoden	34
3.1. Probenmaterial	34
3.2. Orientierung der Kristalle	34
3.3. Herstellung der Proben; Polieren	34
3.4. Bestrahlen der Proben	36
3.5. Arbeiten mit dem Elektronenmikroskop	37
4. Bestimmung von Burgers- und Normalenvektor sowie Defektyp des Versetzungsringes	39

4.1. Experimentelle Beobachtungen	39
4.1.1. Oberflächennormale nahe $\{0001\}$	40
4.1.2. Oberflächennormale nahe $\{2\bar{3}10\}$, „ Prismenebenenorientierung	41
4.1.3. Oberflächennormale nahe $\{11\bar{2}2\}$, „ Pyramidenenebenenorientierung	43
4.2. Deutung der experimentellen Beobachtungen	43
4.2.1. allgemeine Schlußfolgerungen	43
4.2.2. Folgerungen aus den Aufnahmen mit Folienorientierung nahe $\{0001\}$	44
4.2.3. Bestimmung des Burgersvektors	45
4.2.4. Bestimmung des Normalenvektors	46
4.2.5. Defekttyp	49
4.2.6. Ergebnis	49
5. Weitere experimentelle Ergebnisse	51
5.1. Vergleich der beobachteten mit berech- neten KF.; Abbildung derselben Defekte mit verschiedenen Beugungsvektoren	51
5.2. Defektausbeute und Defektgröße	56
5.3. Nicht abgescherte Defekte	57
5.4. Häufigkeit der einzelnen Typen	59
5.5. Reorientierung des Normalenvektors	60
5.6. Kontrastfiguren im symmetrischen Drei- strahlfall	61
5.7. Kontrastfiguren von Versetzungsringen in Zwischenschichten	62
6. Diskussion	63
6.1. Defekttyp	63
6.1.1. Kubisch - flächenzentrierte Metalle	63
6.1.2. Kubisch - raumzentrierte Metalle	63
6.1.3. Hexagonale Metalle - einige Ergebnisse	64
6.2. Ausbeute	67
7. Zusammenfassung	69
8. Anhang I. Ergänzende Bemerkungen zum Arbeiten mit dem Elektronenmikroskop	71

9. Anhang II, Äquidensitenttechnik	73
9.1. Äquidensiten - Theoretischer Teil	73
9.2. Äquidensiten - ästhetischer Teil	76
10. Anhang III. Indizierung von Richtungen und Ebenen im hexagonalen Gitter; reziprokes und pseudoreziprokes Gitter	79
Literaturverzeichnis	82

1. EINLEITUNG

Bestrahlt man Metalle mit hochenergetischen Teilchen, können je nach Versuchsbedingungen verschiedene Gitterdefekte entstehen. Besitzt das einfallende Teilchen eine genügend hohe Masse (Schweratomion) und eine genügend hohe Energie, entsteht zunächst eine Defektkaskade, bestehend aus Zonen hoher Leerstellen- und Zwischengitteratomdichte. Aus energetischen Gründen kann oberhalb einer gewissen Größe der Defektkaskade eine Umlagerung in ein günstigeres Arrangement der Punktfehler erfolgen. Meistens entstehen dabei Versetzungsringe oder Stapelfehlertetraeder. Die Erforschung ihrer Entstehung, Struktur und Größe gewinnt seit einigen Jahren immer mehr an Interesse. Dies hat mehrere Gründe. So erfordert der Bau von Reaktoren und anderen Geräten, die Bestrahlung ausgesetzt sind, eine genaue Kenntnis des Verhaltens verschiedener Materialien bei Bestrahlung. In der Festkörperphysik ist der Einfluß der verschiedenen Defekte auf andere Eigenschaften eines Materials oft von großer Bedeutung (z.B. Strahlungsverfestigung). Außerdem können durch Bestrahlung erzeugte Defekte ein Hilfsmittel bei der Erforschung anderer Eigenschaften sein (z.B. Versetzungsspinning).

Zur Erforschung der entstandenen Punktfehleragglomerate hat sich nun, sofern diese eine Größe von ungefähr $10 - 20 \text{ \AA}$ überschreiten, die Durchstrahlungselektronenmikroskopie sehr bewährt. Dann ist es nämlich meist möglich, ein "Bild" des Defekts zu beobachten und zu photographieren. Jedoch bringt die Kleinheit der Defekte eine Reihe von Schwierigkeiten mit sich, die dazu führen, daß das erhaltene Bild mit den zugrundeliegenden Defekt nur durch mehr oder weniger komplizierte Rechnungen verknüpft werden kann. Eine Zusammenfassung der bisherigen Ergebnisse geben Wilkens /1/ und Rühle /2/. Vor allem bei kleinen Versetzungsringen kann eine große Mannigfaltigkeit von Kontrasten auftreten. Ziel der Kontrasttheorie

ist es, aus den bei bekannten Abbildungsbedingungen entstandenen Kontrasten alle nötigen Daten über die zugrunde liegenden Defekte zu entnehmen. Für die dazu entwickelten Methoden siehe /3/4/5/6/.

Es hat sich gezeigt, daß die durch Beschuß mit schnellen Neutronen oder hochenergetischen Ionen erzeugten Defektkaskaden sich oft zu Versetzungsringen umordnen. Dies geschieht durch Kondensation der Punktfelder auf kristallographischen Ebenen. Je nachdem der dann erzeugte Versetzungsring durch Leerstellen oder Zwischengitteratom-Kondensation entstanden ist, sprechen wir vom Leerstellen- oder Zwischengitteratom-Typ. Durch immer mehr verfeinerte Beobachtungen und Rechnungen wurde in den vergangenen Jahren die Natur der Strahlenschädigung in flächenzentrierten /7/8/9/10/11/, aber auch in raumzentrierten Metallen weitergehend aufgeklärt /12/13/.

Über elektronenmikroskopische Untersuchungen der Defektstruktur in hexagonalen Metallen liegen jedoch nur wenig Daten vor. Soweit uns bekannt ist, sind kleine Versetzungsringe bisher nur in Rhenium untersucht worden (Brimhall und Mastel /15/). Aus der Analyse der entstandenen Schwarz-Weiß-Kontraste (S-W-Kontraste) bei dynamischen Abbildungsbedingungen schlossen Brimhall und Mastel auf kleine Versetzungsringe mit Burgersvektoren $\underline{b} = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$. Dies bedeutet, daß der Versetzungsring nicht in der Basis-ebene liegen kann. In anderen hexagonalen Stoffen wurden bisher nur große Versetzungsringe untersucht, die oft durcheinander nach der Bestrahlung durchgeführten Erholung erzeugt wurden. So fanden beispielsweise Bernstein und Gulden in neutronenbestrahltem Zirkonium nach Erholung große Versetzungsringe mit $\underline{b} = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ /14/. In anderen Stoffen, z.B. in Graphit, und in bei $T \lesssim 700^\circ\text{C}$ neutronenbestrahltem

Berylliumoxid sind jedoch auch Versetzungsringe auf der Basisebene gefunden worden (siehe den Übersichtsartikel von Rühle /2/). Nach Verformung von Zinkeinkristallen fand Pfeiffer ebenfalls Versetzungsringe auf der Basisebene /16/17/. Auch wurden Evidenzen gefunden, daß Versetzungsringe auf Pyramidenebenen liegen können /16/.

Ziel unserer Untersuchungen ist es, die Natur der nach Beschuß mit schweren hochenergetischen Ionen entstandene Strahlenschädigung in Kobalt aufzuklären. Hochenergetische Ionen anstelle von Neutronen wurden gewählt, weil sie eine Reihe von Vorteilen bieten. So ist z.B. die Energie der Ionen im Gegensatz zu den meist nicht monoenergetischen Neutronen genau bekannt. Dies bedeutet, daß die entstandenen Defekte für diese Energie typisch sind. Ferner ist die Durchführung der Bestrahlung wesentlich einfacher, auch sind die Bestrahlungsdaten besser zu kontrollieren und variieren. Weiterhin treten keine Kernprozesse auf, die zu einer Aktivierung des Präparates führen können. Allerdings ist die Eindringtiefe der Ionen sehr gering ($\approx 100 \text{ \AA}$), die Defekte entstehen deshalb nahe der Probenoberfläche (kein Nachteil bei elektronenmikroskop. Beobachtung). Kobalt als Probenmaterial ist deshalb von besonderem Interesse, weil es einerseits zu den wichtigsten hexagonalen Metallen gehört, andererseits ein fast ideales Achsenverhältnis c/a hat. Aus diesen Gründen wurden die durch die ferromagnetischen Eigenschaften verursachten Erschwerungen der experimentellen Arbeit in Kauf genommen. Um aus den erhaltenen Bildern zweifelsfreie Aussagen über die Art der Defektstruktur machen zu können, wurde die von Wilkens und Rühle gegebene Theorie der Kontrastfiguren kleiner Versetzungsringe /5/ in ihrem Verhalten gegenüber Variation verschiedener Parameter genau untersucht und stellenweise erweitert.

2. THEORETISCHE GRUNDLAGEN

In diesem Kapitel wird kurz auf die Kontrastentstehung im Elektronenmikroskop eingegangen (für ausführliche Darstellungen siehe /18/), sowie die grundsätzlichen Eigenschaften des Kontrastes kleiner Versetzungsringe erläutert. Die von Wilkens und Rühle /5/ angegebene Näherungsformel zur Berechnung der Linien gleichen Kontrastes für kleine Versetzungsringe wird ausführlich diskutiert und in einigen Punkten erweitert. Eine ähnliche Formel zur Berechnung des Kontrastes für kleine Versetzungsringe in den sogenannten Zwischenschichten wird abgeleitet.

2.1. Theorie der Elektronenbeugung; Kontrastentstehung im Elektronenmikroskop

Das Phänomen der Elektronenbeugung an Kristallen kann verstanden werden, wenn man ein Elektron mit dem Impuls p als Materiewelle mit der Wellenlänge $\lambda = h/p$ auffaßt. (de Broglie'sche Beziehung). Der Impuls, und damit die Wellenlänge, hängt ab von der Energie bzw. der Beschleunigungsspannung U der Elektronen; z.B. beträgt $\lambda = 0,0296 \text{ \AA}$ bei $U = 150 \text{ kV}$. Die Beugungserscheinung kann aufgefaßt werden als Reflexion des Elektronenstrahls an einer Netzebenenschar, die jedoch nur dann zu einem Effekt führt, wenn die von allen Atomen der Netzebenenschar ausgehenden Kugelwellen sich konstruktiv überlagern. Dies tritt dann ein, wenn die Bragg-Bedingung erfüllt ist:

$$n \cdot \lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

n = Reflexordnung
 θ = Glanzwinkel
 d_{hkl} = Netzebenenabstand

In der vorliegenden Arbeit wird das Präparat mit Hilfe eines Goniometers bezüglich des Elektronenstrahls immer so orientiert, daß in guter Näherung nur eine einzige Netzebenenschar die Bragg-Bedingung exakt oder nahezu exakt erfüllt. In diesem Fall spricht man von einem Zwei-

strahlfall, da nur zwei Elektronenstrahlen das Präparat verlassen; der Primärstrahl und ein abgebeugter Strahl.

Zur Charakterisierung der beugenden Ebenenschar verwendet man den Beugungsvektor $\underline{g}$. Er ist derjenige Vektor im reziproken Gitter, der senkrecht auf der beugenden Ebenenschar steht.

Für einen unendlich ausgedehnten Kristall ist die Bragg-Bedingung nur für exakt definierte Winkel θ erfüllbar, d.h. die Intensitätsverteilung im reziproken Gitter besteht aus Punkten. Durch die in einer Dimension kleinen Abmessungen der Probe weiten sich die Intensitätsverteilungen im reziproken Gitter zu Stäbchen senkrecht zur Folienebene aus. Man erhält dann noch eine merkliche Intensität im abgebeugten Strahl für kleine Abweichungen aus der exakten Bragg-Lage. Ein Maß für diese Abweichung ist der Anregungsfehler s ; definiert als $s = \underline{g} \cdot \Delta\theta$.

($\Delta\theta = \theta_{\text{Bragg}} - \theta =$ Verkippung aus der Bragg-Lage; siehe Fig. 2.1.). Ist $s \approx 0$, spricht man vom dynamischen Fall.

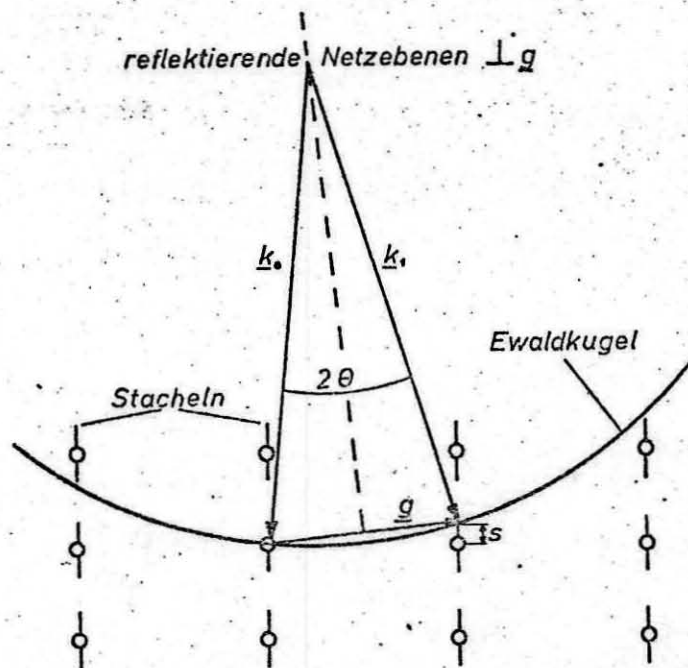


Fig. 2.1. Ewald-Kugel im reziproken Gitter

Im Elektronenmikroskop wird mit Hilfe der Objektivblende der abgebeugte oder der Primärstrahl ausgeblendet. Man spricht dann von Hellfeld- bzw. Dunkelfeldmikroskopie.

Der jeweils zur Abbildung herangezogene Strahl enthält Informationen aus allen Gebieten des Kristalls. Die Abhängigkeit der lokalen Intensität im Hellfeld (I_0) bzw. im Dunkelfeld (I_g) an der Unterseite der Probe von Gitterbaufehlern, speziell von Struktur, Größe und Lage der kleinen Versetzungsringe zu berechnen, ist Ziel der mathematischen Beugungstheorie in unserem Fall.

Im nächsten Abschnitt wird ein kurzer Aufriß der Theorie gegeben, soweit diese zum Verständnis der hier benutzten Begriffe notwendig ist. Für weitergehende Abhandlungen siehe /19/.

2.2. Kontrasttheorie

2.2.1. allgemeine Grundlagen

Zu lösen ist die Schrödingergleichung in einem Kristall mit bekannter Anordnung der Atome (d.h. im Falle eines gestörten Kristalls bei bekanntem Verschiebungsfeld des Defekts) und gegebenen Randbedingungen (im Zweistrahlfall eine einfallende und zwei austretende ebene Wellen). Zur Lösung entwickelt man das Kristallpotential in eine Fourierreihe und setzt die Wellenfunktionen im Innern des Kristalls als Linearkombination von Blochwellen an. Aus den Randbedingungen im Zweistrahlfall ergibt sich, daß nur zwei Blochwellen angeregt sind, die Wellenfunktion lautet dann:

$$\psi(r) = \psi^{(1)}(r) \cdot \psi^{(1)}(r) + \psi^{(2)}(r) \cdot \psi^{(2)}(r).$$

$\psi^{(1)}, \psi^{(2)}$ sind die beiden Blochwellen; $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}$ ihre jeweiligen Anregungsstärken, die nur im exakt periodischen, (perfekten) Kristall konstant sind.

Für einen Kristall mit Baufehlern gehorchen die Anregungsstärken folgenden, für $s = 0$ angegebenen Differentialgleichungen (z = Koordinate parallel zur Einstrahlrichtung):

$$\frac{d\psi^{(1)}}{dz} = i\pi u_z \exp(2\pi\tau_z z) \exp(-2\pi i\epsilon z) \cdot \psi^{(2)}(z)$$

$$\frac{d\psi^{(2)}}{dz} = i\pi u_z \exp(-2\pi\tau_z z) \exp(2\pi i\epsilon z) \cdot \psi^{(1)}(z)$$

$$\text{mit } u_z = \frac{d(g \cdot R)}{dz}, \quad R = \text{Verschiebungsfeld}.$$

Die beiden im obigen Gleichungssystem auftretenden Größen ϵ und τ_z haben grundlegende Bedeutung und werden deshalb kurz erläutert. Da die beiden Blochwellen voneinander leicht abweichende z -Komponenten der Wellenvektoren haben, ist ihre Differenz eine charakteristische Größe, die durch ϵ gegeben wird. Die beiden Blochwellen können miteinander interferieren, dabei entsteht deshalb eine Art "Schwebung". (Z.B. "pendelt" I_o bzw. I_g an der Unterseite einer Folie in Abhängigkeit von ihrer Dicke mit der Wellenlänge dieser Schwebung; "Pendellösungen"). Diese Wellenlänge ist eine charakteristische Größe und heißt Extinktionslänge ξ_1 . Sie ist mit ϵ über die Beziehung $\xi_1 = 1/\epsilon$ verknüpft. Die Extinktionslänge hängt ab von der Art des Kristalls, d.h. von den Fourierkoeffizienten des Potentials; der jeweiligen zur Beugung herangezogenen Netzebenencharakter, und von der Wellenlänge der Elektronen. Sie bestimmt im wesentlichen das Auflösungsvermögen bei der elektronenmikroskopischen Abbildung von Kristallbaufehlern.

Betrachtet man die beiden Blochwellen genauer, stellt man fest, daß die eine ($\psi^{(1)}$) am Ort der Atome große, die andere ($\psi^{(2)}$) kleine Aufenthaltswahrscheinlichkeiten hat. Damit wird verständlich, daß $\psi^{(1)}$ stärker geschwächt wird als $\psi^{(2)}$. Diese anormale Absorption - sie tritt zur normalen, für beide Blochwellen gleich großen Absorption hinzu - wird pauschal durch die Einführung eines komplexen Potentials beschrieben und durch die sogenannte anormale

Absorptionslänge ξ'_g in den Blochwellenlösungen berücksichtigt. Sie ist mit τ_g über die Beziehung $\xi'_g = 1/\tau_g$ verknüpft. ξ'_g hat ebenfalls die Dimension $[cm]$ und gibt demnach die Differenz der Absorptionskonstanten der beiden Blochwellen an.

2.2.2. Kontrasttheorie für kleine Versetzungsringe

Wir benötigen Lösungen des Differentialgleichungssystems für einen kleinen Versetzungsring (klein gegenüber der Extinktionslänge) mit dem Burgersvektor $\underline{b}$ und dem Normalenvektor $\underline{n}$. Der Normalenvektor $\underline{n}$ steht senkrecht auf der Habitusebene des Versetzungsringes und dient zu ihrer Charakterisierung. $\underline{n}$ und $\underline{b}$ müssen dabei nicht notwendigerweise parallel sein, d.h. der Ring kann Scherkomponenten enthalten. Alle folgenden Formeln gelten für Versetzungsringe vom Leerstellentyp, d.h. $(\underline{n} \cdot \underline{b}) > 0$ (Definition nach Kroupa /20/).

Für Defekte klein gegenüber ξ_g können die Differentialgleichungen in einer 1. Bornschen Näherung integriert werden. Ist die Folie dick genug, um die durch die anormale Absorption stark geschwächte Blochwelle $\psi^{(n)}$ hinreichend zu unterdrücken ("Näherung dicker Folien"), ergibt sich für einen Ring nahe $z = 0$ /5/

$$\text{im Hellfeld: } I_o(x,y) = I_{o,\infty} (1+S(x,y))$$

$$\text{im Dunkelfeld: } I_g(x,y) = I_{g,\infty} (1+S(x,y))$$

Für einen Ring nahe $z = t$ ergibt sich:

$$\text{im Hellfeld: } I_o(x,y) = I_{o,\infty} (1-S(x,y))$$

$$\text{im Dunkelfeld: } I_o(x,y) = I_{o,\infty} (1+S(x,y))$$

Dabei ist folgendes Koordinatensystem zugrunde gelegt:

x, y = Koordinaten in der Bildebene; pos. x -Achse parallel $\underline{g}$; $x = 0, y = 0$ im Zentrum des Ringbildes.

z = Koordinate in Richtung des Elektronenstrahls
 $z = 0$ in der oberen Folienfläche, durch die der Elektronenstrahl in die Folie eintritt.

$I_{o,\infty}$; $I_{g,\infty}$ = Hintergrundintensitäten in großer Entfernung vom Ringzentrum.

Mit $\underline{R}(x, y, z)$ = Verschiebungsfeld des Ringes und $u = (\underline{g} \cdot \underline{R})$;
 $u_z = du/dz$ ergibt sich nach /5/

$$S(x, y) = 2\pi \int_0^t u_z \exp(-2\pi \tau_z z) \sin(2\pi \epsilon z) dz$$

mit t = Foliendicke

Ziel der Näherungsrechnung ist es, eine einfache Formel für die Linien gleichen Kontrastes (= Kontrastfiguren = KF.) herzuleiten. Der Kontrast $C(\varphi, \psi)$ (φ, ψ = Polarkoordinaten) ergibt sich aus der Intensität über die Beziehung

$$C(\varphi, \psi) = (I(\varphi, \psi) - I_\infty) / I_\infty = S(\varphi, \psi) \quad (\text{Hellfeld})$$

Kontrastfiguren erhält man aus dieser Gleichung, indem man für konstantgehaltenes $C(\varphi, \psi)$ die Gleichung nach φ auflöst.

Für das Integral $S(\varphi, \psi)$ ergibt sich unter geeigneten Annahmen, von denen die wesentlichste die Verwendung der "Kräfte-Dipol-Näherung" nach Kroupa /20/ für das Verschiebungsfeld eines kleinen Versetzungsringes ist:

$$S(\varphi, \psi) = S_s + S_a$$

$$S_s = \exp(-2\pi r z_0) \sin(2\pi \epsilon z_0) 2\pi Q \left\{ \chi K_1(\chi) F_s^{(1)}(\varphi^*) + K_0(\chi) F_s^{(2)}(\varphi^*) \right\}$$

$$S_a = \exp(-2\pi r z_0) \cos(2\pi \epsilon z_0) 2\pi Q \left\{ K_1(\chi) F_a^{(1)}(\varphi^*) + K_0(\chi) F_a^{(2)}(\varphi^*) \right\}$$

Dabei ist

$K_0(\chi), K_1(\chi)$ = modifizierte Hankelfunktionen 0-ter bzw.

1-ter Ordnung; $\chi = 2\pi \epsilon Q$

$Q = (\delta A g b \pi^2) / (1 - \nu) \xi_3^2$; δA = Ringfläche

$$F_s^{(1)} = a_0^{(1)} + a_2^{(1)} \cos 2\varphi^* + b_2^{(1)} \sin 2\varphi^*$$

$$F_s^{(2)} = a_0^{(2)} + a_2^{(2)} \cos 2\varphi^* + b_2^{(2)} \sin 2\varphi^*$$

$$F_a^{(1)} = a_1^{(1)} \cos \varphi^* + a_3^{(1)} \cos 3\varphi^* + b_1^{(1)} \sin \varphi^* + b_3^{(1)} \sin 3\varphi^*$$

$$F_a^{(2)} = a_1^{(2)} \cos \varphi^* + a_3^{(2)} \cos 3\varphi^* + b_1^{(2)} \sin \varphi^* + b_3^{(2)} \sin 3\varphi^*$$

$$a_0^{(1)} = -(n_x \beta_z + n_z \beta_x) \quad a_2^{(1)} = a_0 \quad b_2^{(1)} = -(n_y \beta_z + n_z \beta_y)$$

$$a_0^{(2)} = 2(1 - 2\nu) a_0^{(1)} \quad a_2^{(2)} = b_2^{(2)} = 0$$

$$a_1^{(1)} = (5 - 4\nu) n_x \beta_x + (4\nu - 1) n_y \beta_y + 4\nu n_z \beta_z$$

$$a_3^{(1)} = n_x \beta_x - n_y \beta_y$$

$$b_1^{(1)} = (3 - 4\nu) b_3^{(1)} \quad b_3^{(1)} = (n_x \beta_y + n_y \beta_x)$$

$$a_1^{(2)} = 0,5 (3n_x \beta_x + n_y \beta_y - 4n_z \beta_z) \quad a_3^{(2)} = 0,5 a_3^{(1)}$$

$$b_1^{(2)} = b_3^{(2)} = 0,5 b_3^{(1)}$$

$$\underline{\beta} = \underline{b}/|\underline{b}| \quad ; \quad \nu = \text{Querkontraktionszahl}$$

z_0 = Abstand des Ringes von der oberen Folienoberfläche

für Ringe nahe der unteren Folienoberfläche ist

z_0 durch $t - z_0$ zu ersetzen

Wie man den obigen Formeln entnimmt, kann im Rahmen dieser Theorie keine Unterscheidung zwischen $\underline{n}$ und $\underline{b}$ getroffen werden, da die a_i, b_i bei Vertauschung von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ ihren Wert nicht ändern.

Der Term $\exp(-2\pi i z_0)$ rührt her von der anormalen Absorption und bewirkt ein Schwächerwerden und schließliches Verschwinden des Kontrastes mit zunehmender Tiefe des Defektes in der Folie. Er beeinflusst also nur die Größe, nicht die Form der KF.

Der cos- und der sin-Faktor bei S_s bzw. S_a sorgen dafür, daß gilt:

$$\begin{aligned} S_s\text{-Term} &= 0 \quad \text{für } z_0 = 0; \frac{1}{2}\xi_0; \xi_0 \dots \\ S_a\text{-Term} &= 0 \quad \text{für } z_0 = \frac{1}{4}\xi_0; \frac{3}{4}\xi_0 \dots \end{aligned}$$

Man kann die Oberflächenregion deshalb in Schichten unterteilen, mit den Grenzen an den Nullstellen des S_a -Terms, also in den Maxima des S_s -Terms. Betrachtet man Versetzungsringe, die in den Schichten liegen, so überwiegt der S_a -Term; der S_s -Term ist klein und kann vernachlässigt werden. In den Grenzregionen zwischen zwei Schichten überwiegt der S_s -Term, der S_a -Term kann vernachlässigt werden. Die Dicke der Bereiche, in denen der S_a bzw. der S_s -Term überwiegt, hängt von der absoluten Größe der beiden Terme ab. Wie in /5/ gezeigt wird, ist der S_s -Term nur im Gebiet nahe der Grenze zwischen zwei Schichten, in der sogenannten Zwischenschicht groß genug, um über den S_a -Term zu dominieren. Das heißt die Schichten sind dick, die Zwischenschichten dünn. Man kann daraus schließen, daß KF. die durch Versetzungsringe in den Zwischenschichten bestimmt sind, nur selten beobachtet werden. Dies ist auch der Fall, jedoch kommt, wie in 2.3.9. gezeigt wird hinzu, daß diese KF. manchmal auch aus anderen Gründen nicht auftreten.

Bevor nun auf die Berechnung der KF. näher eingegangen wird, sollen die allgemeinen Eigenschaften des Kontrastes kleiner Versetzungsringe zusammengestellt und einige weiter hinten benötigte Begriffe definiert werden.

- (1) Wenn der Ring in der Nähe einer der beiden Folienoberflächen liegt, zeigt er bei dynamischer Abbildung einen Schwarz-Weiß-Kontrast (S-W-Kontrast), der durch die erste Bornsche Näherung berechnet werden kann.
- (2) In den meisten Fällen ist es möglich, einen Vektor $\underline{l}$ zu definieren; er weist auf dem Positiv vom Schwarzen zum Weißen Teil des S-W-Kontrastes und heißt S-W-Vektor.
- (3) Die Richtung von $\underline{l}$ relativ zu $\underline{g}$ hängt ab von der Richtung von $\underline{b}$ und $\underline{n}$ relativ zu $\underline{g}$; der Tiefe des Rings in der Folie; vom Ringtyp (Leerstellen- oder Zwischengitteratomtyp) und von der Abbildungsart. (Hell- oder Dunkelfeld). Speziell wechselt $\underline{l}$ das Vorzeichen, wenn der Ring statt in der n -ten in der $(n \pm 1)$ -ten Schicht liegt. (Siehe Fig. 2.2.).

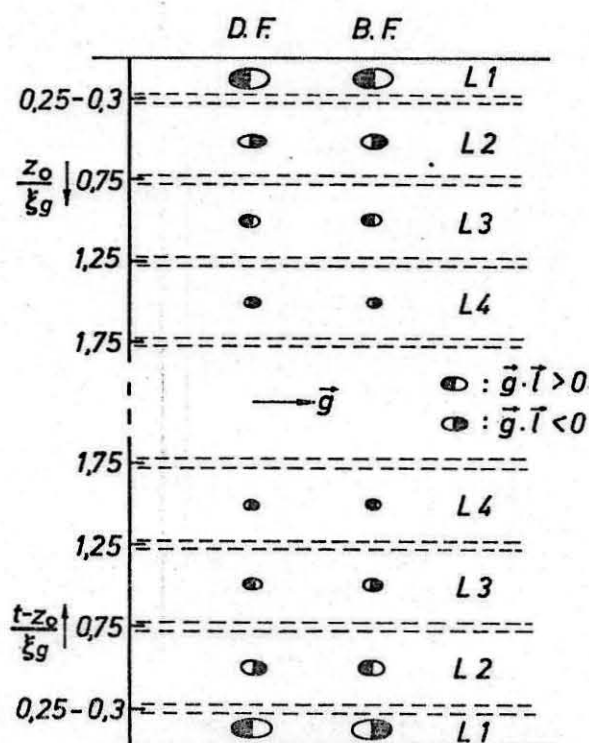


Fig. 2.2. Tiefenabhängigkeit des S-W- Kontrastes
eines Versetzungsringes vom Leerstellentyp
B.F. = Hellfeld

- (4) Die Größe der S-W-Kontraste sagt über die Größe des zugrundeliegenden Ringes nur indirekt etwas aus. Nach /2/ beträgt der Kontrastdurchmesser, gemessen an der Grenze zwischen schwarzem und weißem Teil, das 1,2 bis 1,4-fache des tatsächlichen Ringdurchmessers.
- (5) Die Form der KF. läßt sich in 4 Gruppen einteilen: Normale KF.; schwach gestörte KF.; stark gestörte KF. und sogenannte "Schmetterlinge". Sie hängt in erster Linie vom Winkel zwischen $\underline{g}$ und dem mittleren Orientierungsvektor $\underline{m}$ ab. (Siehe Fig. 2.3). Der mittlere Orientierungsvektor ist definiert als:

$$\underline{m} = (\underline{n} + \underline{\beta}) / |\underline{n} + \underline{\beta}|$$

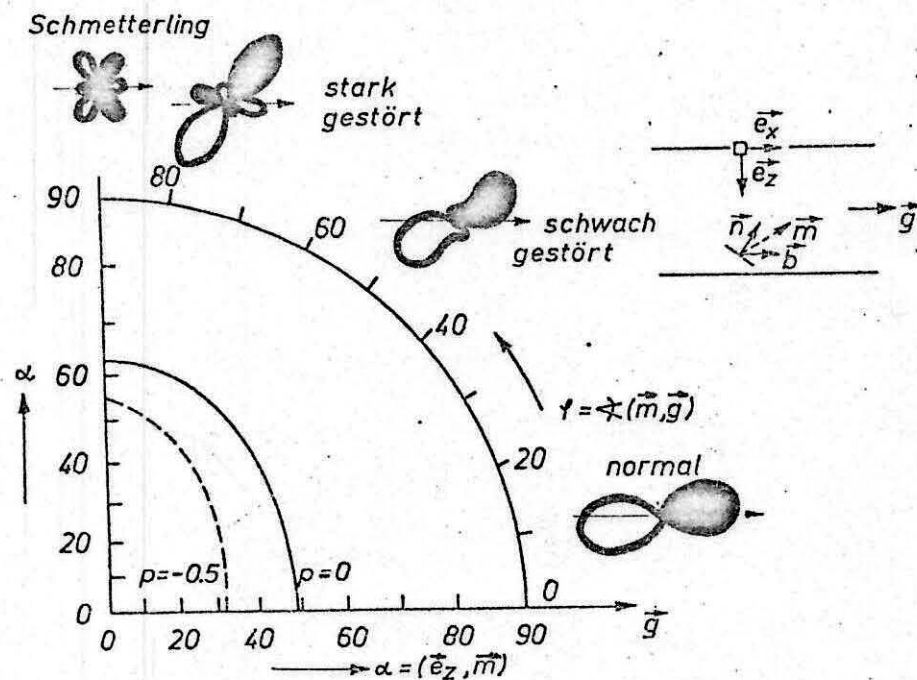


Fig. 2.3. Klassifizierung der Kontrastfiguren

In der Praxis wird der überwiegende Teil der KF. durch den S_a -Term bestimmt. In /5/ wurde die Ableitung der Formel für KF. deshalb auch auf diesen Fall beschränkt. Man erhält als Endformel:

$$\varphi = \frac{C}{\Delta I} \cdot F_a^{(n)}(\varphi^*)$$

C enthält dabei alle Konstanten, die in die Größe der KF. eingehen, wie z.B. die Tiefenlage des Ringes in der Folie; die Größe des Ringes; die Beträge von Burgers- und Beugungsvektor sowie die Größe von ξ_1 und ξ_2 . ΔI ist die relative Abweichung von der Hintergrundintensität. Bei der Berechnung kann $C/\Delta I = 1$ gesetzt werden, wenn man nur an einem relativen Vergleich der KF. interessiert ist. Für Leerstellenringe, die in der ersten Schicht an der Unterseite der Probe liegen, ist für Abbildung im Hellfeld $C < 0$; das Vorzeichen von ΔI muß also dem Vorzeichen von $F_a^{(n)}(\varphi^*)$ entgegen gesetzt sein. Die KF. gibt also die Kurve gleichen Kontrastes für positives und negatives ΔI d.h. sie umfährt den dunklen ($F_a^{(n)}(\varphi^*) > 0$) und den hellen Teil ($F_a^{(n)}(\varphi^*) < 0$) des S-W-Kontrastes.

2.2.3. Orientierungsparameter p

Bei der Ableitung der Gleichung für die KF. wurde letztlich $F_a^{(2)} \approx 0,5 F_a^{(1)}$ gesetzt. Diese Näherung sollt nur gerechtfertigt sein, wenn ein in /5/ eingeführter Orientierungsparameter $p = a_1^{(2)} / a_1^{(1)} \approx 0,5$ beträgt, jedenfalls aber nicht Werte kleiner als $\approx -0,5$ annimmt.

Berechnet man p für einen Versetzungsring mit:

$$\angle(\underline{b}, \underline{n}) = \Delta \varphi = 0^\circ; 30^\circ$$

$$\angle(\underline{n}, \underline{g}) = \varphi^1$$

$\underline{b}, \underline{n}, \underline{g}$ in der x-y-Ebene

so ergeben sich folgende Diagramme (Fig. 2.4.)

¹⁾ Nicht zu verwechseln mit der laufenden Koordinate φ^*

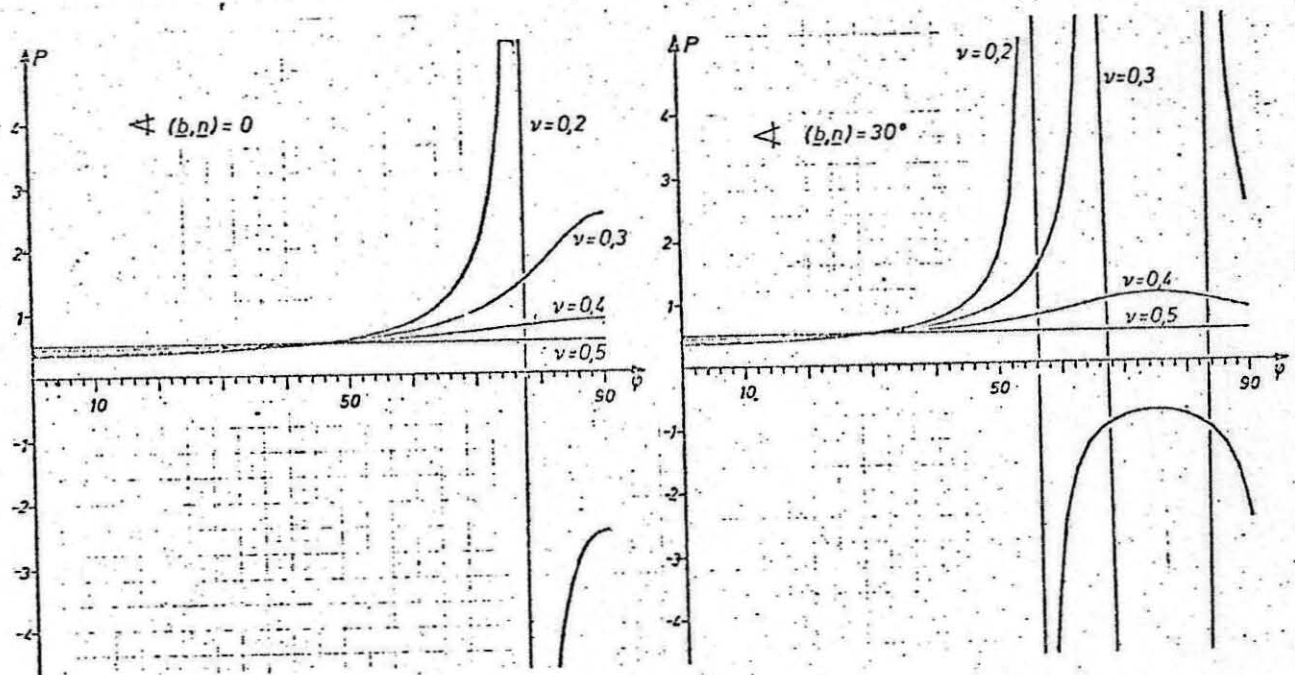


Fig. 2.4. Orientierungsparameter p in Abhängigkeit von $\varphi, \Delta \varphi$ und ν

Die Bedingung $p \approx 0,5$ ist also für ein $\nu > \nu_0$ nicht mehr erfüllt, es treten Singularitäten auf. Der absolute Wert von ν_0 hängt von $\Delta \varphi$ ab, je größer dieser Winkel, desto größer ν_0 . In diesem Bereich sollte die Näherung also nicht anwendbar sein. Nun gibt es aber keinen physikalischen Grund für die ausschlaggebende Rolle der Querkontraktionszahl; d.h. es ist nicht einzusehen, warum die Näherung für manche ν gelten soll, für andere nicht. Das Problem löst sich, wenn man die absoluten Werte von $a_1^{(4)}$ und $a_1^{(2)}$ betrachtet. Denn die störenden Singularitäten treten dann auf, wenn $a_1^{(4)} = 0$ ist. Aus Fig. 2.5. entnimmt man, daß in diesen Bereichen auch $a_1^{(2)}$ klein ist, jedoch nicht die anderen Koeffizienten $a_3^{(4)}$, $b_1^{(4)}$ und $b_5^{(4)}$. Das heißt, in diesem Bereich sind die KF. in erster Linie von den Termen $a_3^{(3)}$ und $b_5^{(4)}$ bestimmt. Der Orientierungsparameter versagt in diesen Bereichen als Kriterium für das Auftreten eines S-W-Kontrastes.

Im folgendem wird deshalb eine Formel für KF. in den Schichten und in den Zwischenschichten benutzt, die den Orientierungsparameter nicht mehr enthält.

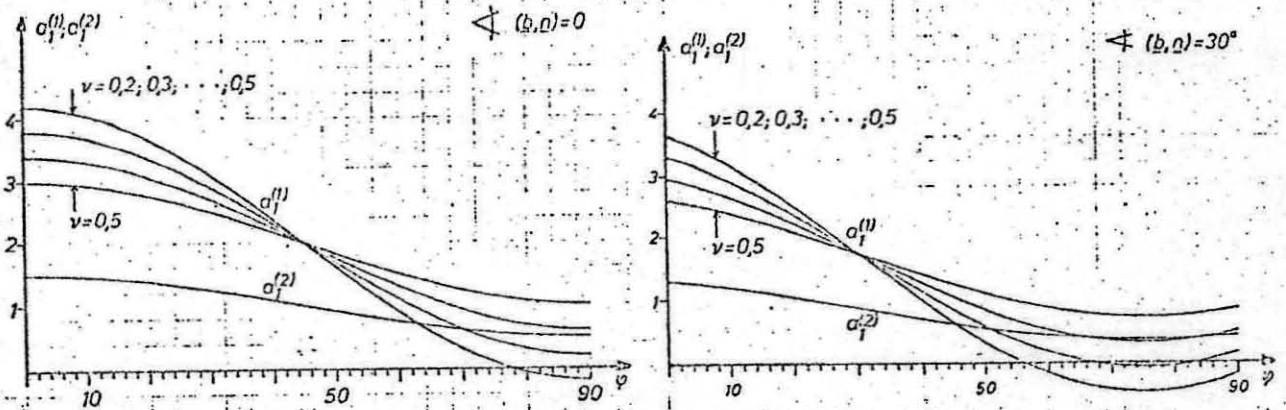


Fig. 2.5. Verlauf von $a_1^{(1)}$ und $a_1^{(2)}$ als Funktion von φ

2.2.4. Kontrastfiguren in den Schichten

Wichtig ist der S_a -Term

$$S_a = \exp(-2\pi\tau z_0) \cos(2\pi\epsilon z_0) \cdot 2\pi Q \left\{ K_1(x) \cdot F_a^{(1)}(\varphi^*) + x \cdot K_0(x) F_a^{(2)}(\varphi^*) \right\}.$$

Die Auflösung dieser Gleichung nach φ , bzw. x ergibt die KF. Will man die Benutzung großer Computer vermeiden, benötigt man einen möglichst einfachen Ausdruck für die modifizierten Hankelfunktionen $K_1(x)$ bzw. für die Funktion $x K_0(x)$. Fig. 2.6 zeigt diese Funktionen im interessierenden x -Bereich von $\approx 0,8 - 2,4$. Denn nur in diesem Bereich ist der Verlauf der Funktionen von Wichtigkeit, für größere x verschwindet der Kontrast, für kleinere versagt die Rechnung sowieso, infolge der "Kräfte-Dipol-Näherung". Ansonsten hat der genaue Verlauf dieser Funktionen auf die KF. keinen großen Einfluß, wichtig ist nur, daß sie monoton abfallen. So bleiben z.B. alle Winkel bei denen $F_1^{(1)}(\varphi^*)$ relative Maxima hat erhalten, unabhängig vom genauen Verlauf der modifizierten Hankelfunktionen. Dies bedeutet,

sowohl der Typ der KF. (normal, schwach-stark verzerrt, Schmetterling), als auch die Richtung des S-W-Vektors bleibt erhalten. Aus diesen Gründen wurden in /5/ die Funktionen $\chi \cdot K_0(\chi)$ und $K_1(\chi)$ proportional zu $1/\chi$ gesetzt, da die dann erhaltene Endformel eine Berechnung der KF. schon mit kleinen Tischrechnern erlaubt.

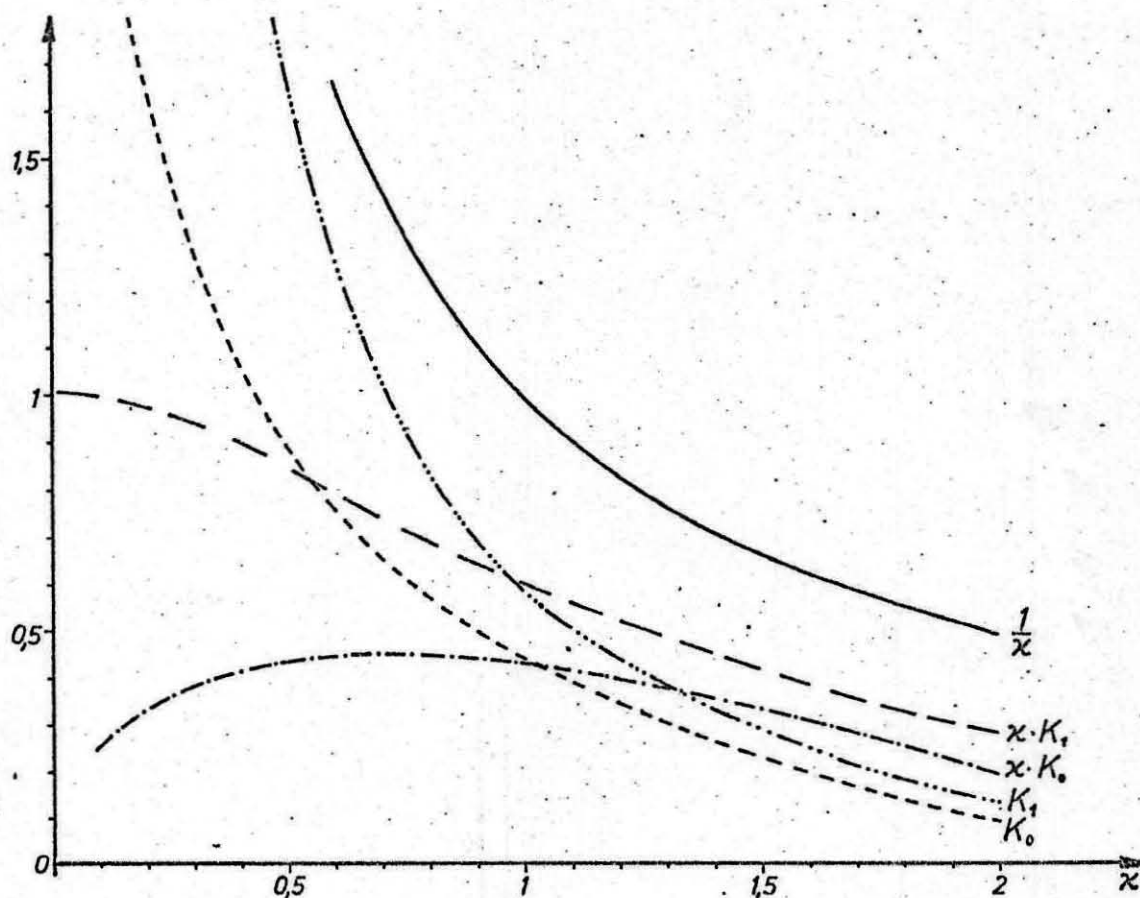


Fig. 2.6. $K_0(\chi)$; $K_1(\chi)$; $\chi K_0(\chi)$ und $\chi K_1(\chi)$ als Funktion von χ im Vergleich zu $1/\chi$

Für S_a folgt unter Beibehaltung dieser Näherung

$$\begin{aligned} S_a &= \exp(-2\pi\tau z_0) \cos(2\pi\delta z_0) \cdot 2\pi Q \cdot \frac{1}{\chi} \{ F_a^{(1)}(\varphi^*) + F_a^{(2)}(\varphi^*) \} \\ &= \frac{q'}{\varphi} \{ (a_1^{(1)} + a_1^{(2)}) \cos \varphi^* + (a_3^{(1)} + a_3^{(2)}) \cos 3\varphi^* \\ &\quad + (b_1^{(1)} + b_1^{(2)}) \sin \varphi^* + (b_3^{(1)} + b_3^{(2)}) \sin 3\varphi^* \}. \end{aligned}$$

Nach φ aufgelöst ergibt sich

$$\varphi = \frac{q'}{\Delta} \cdot F_a(\varphi^*) \quad (q' = \text{Konstante})$$

$$F_a(\varphi) = a_1 \cos \varphi^* + a_3 \cos 3\varphi^* + b_1 \sin \varphi^* + b_3 \sin 3\varphi^*$$

$$a_1 = a_1^{(1)} + a_1^{(2)} = (6,5 - 4\nu)n_x\beta_x + (4\nu - 0,5)n_y\beta_y + (4\nu - 2)n_z\beta_z$$

$$a_3 = a_3^{(1)} + a_3^{(2)} = 1,5(n_x\beta_x - n_y\beta_y)$$

$$b_1 = b_1^{(1)} + b_1^{(2)} = (3,5 - 4\nu)(n_x\beta_y + n_y\beta_x)$$

$$b_3 = b_3^{(1)} + b_3^{(2)} = 1,5(n_x\beta_y + n_y\beta_x)$$

2.2.5. Kontrastfiguren in den Zwischenschichten

Kontrastbestimmend ist in Analogie zu 2.2.4. der Term

$$S_s = q' (\chi K_1(\chi) F_s^{(1)}(\varphi^*) + K_0(\chi) F_s^{(2)}(\varphi^*)).$$

q' enthält wiederum alle nur in die Größe der KF. eingehende Terme. Um die Gleichung nach φ auflösen zu können, müssen wieder möglichst einfache Ausdrücke für die beiden Funktionen $K_0(\chi)$ und $K_1(\chi)$ gefunden werden. Aus Fig. 2.6. entnimmt man aber, daß in gleich guter Näherung wie in 2.2.4. $\chi K_1(\chi)$ und $K_0(\chi)$ wiederum durch $1/\chi$ ersetzt werden können. (Eine Ersetzung durch $1/2\chi$ oder allgemeiner durch $a/b\chi$ ergäbe zwar eine bessere Annäherung, ändert aber nur den Parameter q' , der auf die Gestalt der KF. keinen Einfluß hat.)

Man erhält dann als Endformel:

$$\varphi = \frac{q''}{\Delta l} \{ (3-4\nu) a_2 + a_2 \cos 2\varphi^* + b_2 \sin 2\varphi^* \}$$

$$a_2 = n_x \beta_z + n_z \beta_x$$

$$b_2 = -(n_y \beta_z + n_z \beta_y)$$

2.3. Allgemeine Eigenschaften der Kontrastfiguren

Im folgenden Kapitel werden einige Eigenschaften der KF. untersucht, die sich aus der Mathematik und Physik des Problems ergeben. Ziel ist es, einige allgemeine Regeln abzuleiten, die bei der praktischen Arbeit von Nutzen sein können. Alle Überlegungen sind für Ringe vom Leerstellentyp durchgeführt.

2.3.1. Abhängigkeit der Koeffizienten a_1, a_3, b_1 und b_3 von den Winkeln φ und $\Delta\varphi$

Für die folgenden Überlegungen ist es nützlich, für einige Fälle die a_i und b_i als Funktion des Winkels zwischen $\underline{g}$ und $\underline{n}$ sowie des Winkels zwischen $\underline{n}$ und $\underline{b}$ aufzutragen. Die Querkontraktionszahl ν wurde, soweit sie vorkommt, in den Grenzen von 0,5- 0,2 variiert.

Zur Festlegung von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ sind im allgemeinen vier Winkel notwendig. Für die folgenden Abschnitte beschränken wir uns jedoch auf Fälle, in denen $\underline{g}$, $\underline{n}$ und $\underline{b}$ in einer Ebene liegen. Zur Charakterisierung von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ werden folgende Winkel verwendet:

$$\varphi = \angle(\underline{g}, \underline{n}) \quad \Delta\varphi = \angle(\underline{b}, \underline{n}) = \varphi - \chi$$

$$\chi = \angle(\underline{g}, \underline{b})$$

$$\psi = \text{Drehwinkel um } \underline{g}$$

Da $\underline{n}$ und $\underline{\beta}$ Einheitsvektoren sind, drücken sie sich in diesen Winkeln folgendermaßen aus:

$$\underline{n} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \cdot \cos \psi \\ \sin \varphi \cdot \sin \psi \end{pmatrix} \quad \underline{\beta} = \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \cos \psi \\ \sin \chi \sin \psi \end{pmatrix}$$

Man erhält für $\Delta \psi = 0^\circ, 30^\circ$ folgende Kurven (Fig. 2.7.):

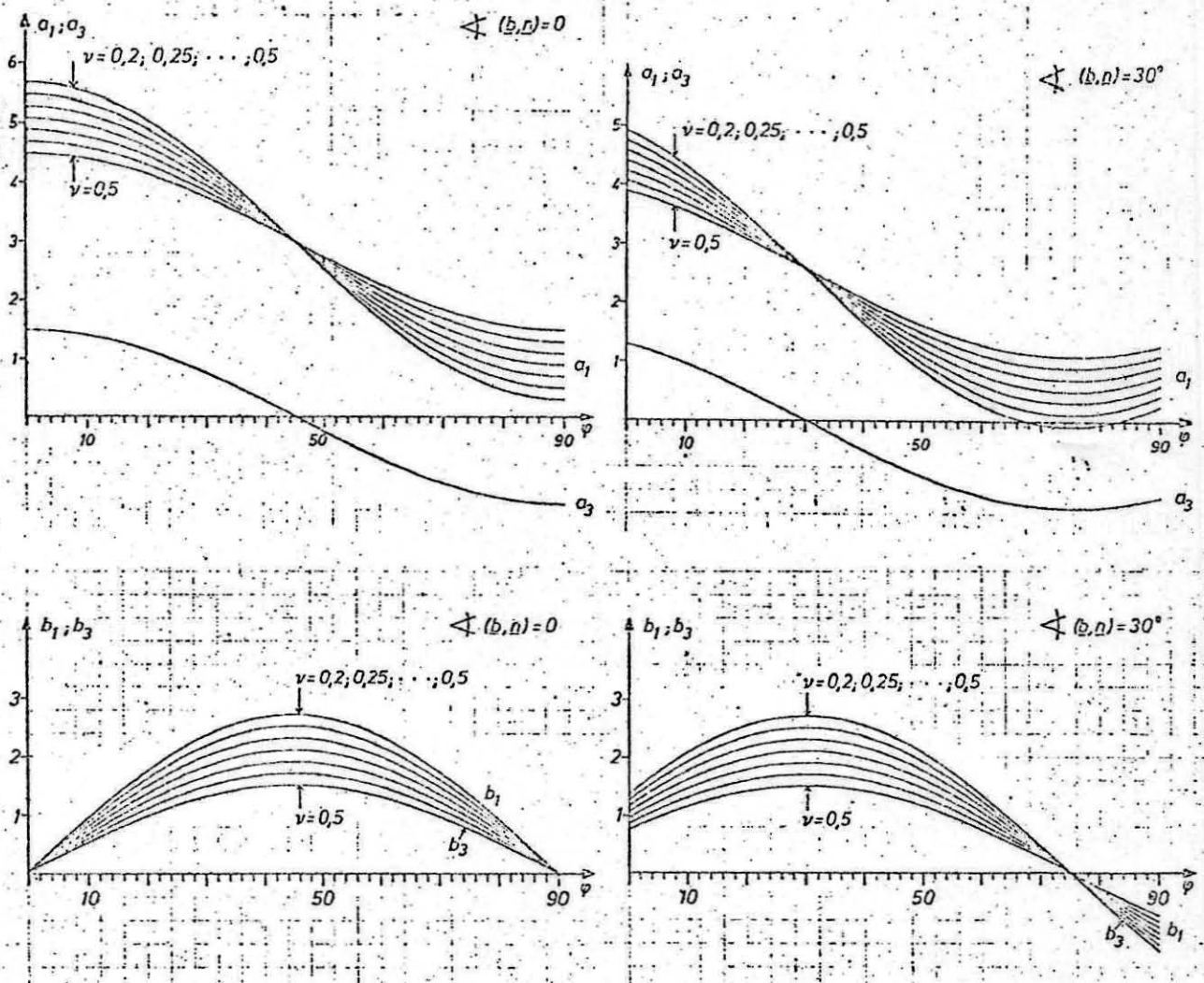


Fig. 2.7. Abhängigkeit der Koeffizienten a_1, b_1 , von $\varphi, \Delta \psi$ und ν . $b_3(\varphi)$ ist identisch mit $b_1(\varphi)$ für $\nu = 0,5$

2.3.2. Berechnung verschiedener KF., speziell für Kobalt

Um einerseits für die nachfolgenden Betrachtungen eine Art Normal zu erhalten, andererseits gleichzeitig für Co gültige Werte zu erhalten, wurde ein Satz KF. errechnet, der mit den für Co erhaltene Daten übereinstimmt. (siehe 4.2.6.). Da die Versetzungsringe eine Habitussebene vom Typ $\{1\bar{1}00\}$ und einen Burgersvektor vom Typ $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ haben, ergeben sich bei Verwendung von $\underline{g} = \{11\bar{2}0\}$ für ψ und χ die folgenden Werte:

ψ	30	30	90	90	150	150
χ	0	60	60	120	120	180
Typ der KF.	A ₁	B ₁	C ₁	C ₂	B ₂	A ₂

Man erhält für die Typen A₁, B₁, C₁, die folgenden KF: (Fig. 2.8.). (Die Typen C₂, B₂, A₂, haben das gleiche Aussehen, wie die C₁, B₁ und A₁-Typen, sie sind lediglich seitenverkehrt bezüglich der Richtung von $\underline{g}$.)

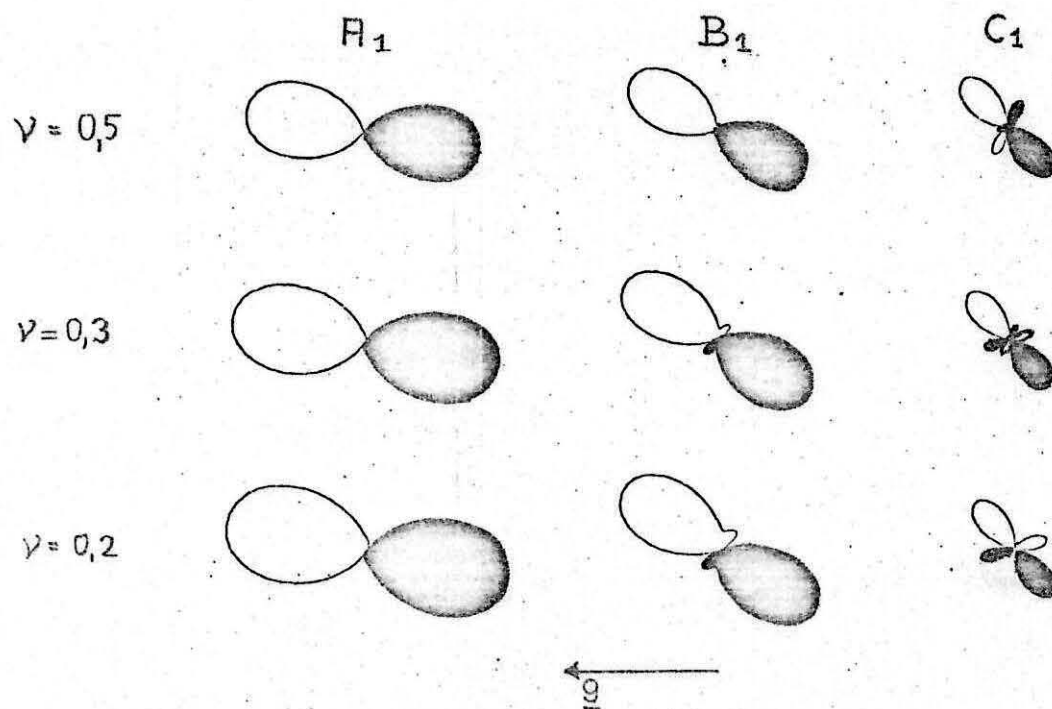


Fig. 2.8. KF. für Co; $\psi = 0^\circ$; $v = 0,5$; $0,3$ und $0,2$

2.3.3. Einfluß der Querkontraktionszahl

Bei der Berechnung der KF. wurde der "unendlich kleine" Versetzungsring im homogen isotropen Medium zugrunde gelegt. Als einziger Materialparameter erscheint die Querkontraktionszahl ν . In stark anisotropen Medien, wie z.B. Kobalt, ist es jedoch fraglich, wie weit die für Polykristalle bestimmte Querkontraktionszahl anwendbar ist. Es ist daher sinnvoll, die Abhängigkeit der KF. von der Querkontraktionszahl zu untersuchen. Deshalb wurden die a_i , b_i für verschiedene ν berechnet. (Fig. 2.7.) Um die aus diesen Kurven folgenden Konsequenzen zu überprüfen, wurden die berechneten KF. in vielen Fällen ebenfalls für verschiedene ν -Werte gezeichnet. Wie man aus Fig. 2.7. entnimmt, ist es günstig, zwei Fälle zu unterscheiden:

$$\begin{aligned} \text{Bereich (1)} \quad \varphi &\leq 45^\circ - \frac{\Delta\psi}{2} \\ \text{Bereich (2)} \quad \varphi &\geq 45^\circ - \frac{\Delta\psi}{2} . \end{aligned}$$

Im Bereich (1) ist der Term a_1 bei kleinem ν immer größer als bei großem ν . Die KF. wird bei kleiner werdendem ν also größer. Andererseits wird der Term b_1 mit wachsendem ν größer, d.h. der Winkel zwischen S-W-Vektor $\underline{l}$ und $\underline{g}$ wird mit wachsendem ν größer werden.

Im Bereich (2) wird a_1 mit zunehmendem ν größer, b_1 kleiner, d.h. die KF. werden mit wachsendem ν ein immer mehr normaler werdendes Aussehen erhalten. Da die Terme a_1 und b_1 jetzt jedoch vergleichbar mit a_3 und b_3 sind, wirken sich Änderungen von ν etwas empfindlicher auf die Gestalt der KF. aus, als im Bereich (1). Fig. 2.8. zeigt nun, daß die vorausgesagten Konsequenzen zwar vorhanden sind, jedoch in der Praxis kaum eine Rolle spielen. Lediglich bei stark gestörten KF. und bei "Schmetterlingen" können eventuell Einflüsse sichtbar werden. Dies demonstriert Fig. 2.9. bei der für $\Delta\psi = 0^\circ$; 30° und $\underline{n}$ und $\underline{b}$

in der "Schmetterlings"-Konfiguration (siehe 2.3.5.) die KF. für verschiedene ϑ -Werte ausgerechnet wurden. Man erkennt, daß der meist schwächere Flügel parallel zu $\underline{g}$ im Extremfall ganz verschwinden oder sogar größer werden kann, als die anderen.

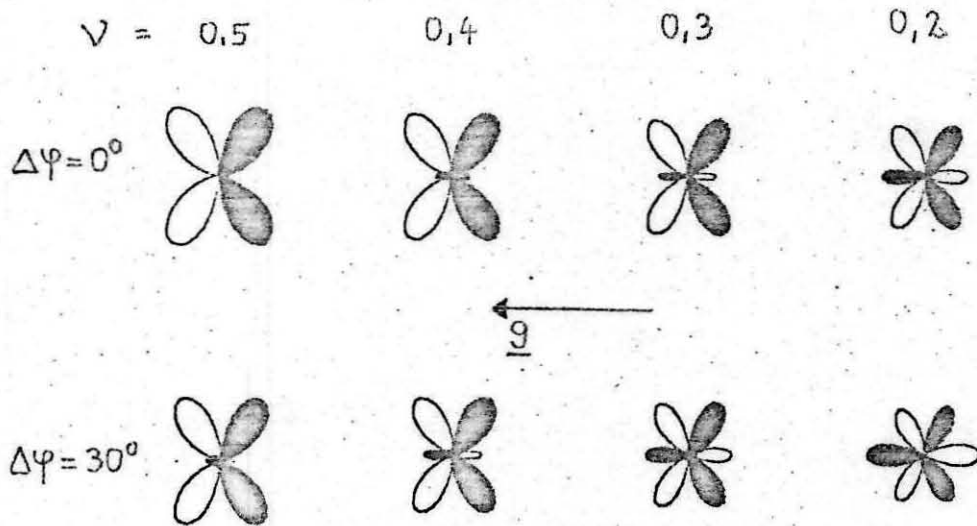


Fig. 2.9. "Schmetterlinge" für $\Delta\varphi = 0^\circ$ und $\Delta\varphi = 30^\circ$,
 $\vartheta = 0,5; 0,4; 0,3; 0,2$

2.3.4. Abhängigkeit der KF. von der z-Komponente von $\underline{b}$ und $\underline{n}$

Die bisherigen KF. wurden für $\underline{g}$, $\underline{b}$ und $\underline{n}$ in einer Ebene berechnet; mit $\psi = 0^\circ$. Bildebene war die $\{0001\}$ -Ebene. Nun wird der Zweistrahlfall i.a. nicht in dieser hochsymmetrischen Orientierung eingestellt, sondern die Folie wird um $\underline{g}$ gedreht. Der Winkel ψ ist also, je nach Folienorientierung und Kippmöglichkeit im Goniometer, in weiten Grenzen frei wählbar. Im folgenden Abschnitt wird nun versucht, ausgehend von $\psi = 0$, einige Regeln abzuleiten, die das Verhalten der KF. bei $\psi \neq 0$ erfassen. Es ist nun sinnvoll, drei Fälle zu unterscheiden:

(1) $\varphi, \chi \leq 30^\circ; \psi = 0^\circ \dots 360^\circ$

In diesem Bereich überwiegt die x-Komponente von $\underline{n}$ und $\underline{b}$; d.h. a_1 wird groß sein, verglichen mit a_3 , b_1 und b_3 . Drehung um $\underline{g}$ lässt die x-Komponente unverändert, die y-Komponente nimmt ab, die z-Komponente zu. Der absolute Wert von a_1 ändert sich kaum; d.h. Größe und Aussehen der KF. ändert sich nur unwesentlich. Der einzige merkbare Effekt besteht in einer Drehung des S-W-Vektors, der von einem maximalen Winkel $\gamma = \chi(-\underline{g}, \underline{p}) \approx (\varphi + \chi)/2$ über $\gamma = 0^\circ$ (bei $\psi = 90^\circ$) zu $\gamma = -(\varphi + \chi)/2$ dreht.

(2) $\varphi, \chi \geq 30^\circ; \psi \leq 30^\circ$

a_3 , b_1 und b_3 nehmen ab; a_1 zwar auch, jedoch langsamer. Die KF. werden daher kleiner und zeigen eine Tendenz zur Normalisierung.

(3) $\varphi, \chi \geq 30^\circ; \psi \geq 30^\circ$

In diesem Gebiet ist die x- und y-Komponente klein, die z-Komponente groß. Für den Grenzfall $\psi = 90^\circ$ verschwinden alle Koeffizienten mit Ausnahme von a_1 und a_3 , die jedoch klein werden. Das bedeutet, daß die KF. so klein werden kann, daß sie nicht mehr erkennbar ist.

Der Übergang zwischen den drei Bereichen ist naturgemäß nicht scharf. Wie jedoch Fig. 2.10. zeigt, darf für $\psi \leq 30^\circ$ in der Praxis $\psi = 0$ gesetzt werden, falls man die Richtung des S-W-Vektors als ungefähr parallel zur Projektion des mittleren Orientierungsvektors $\underline{m}$ auf die x-y-Ebene annimmt.

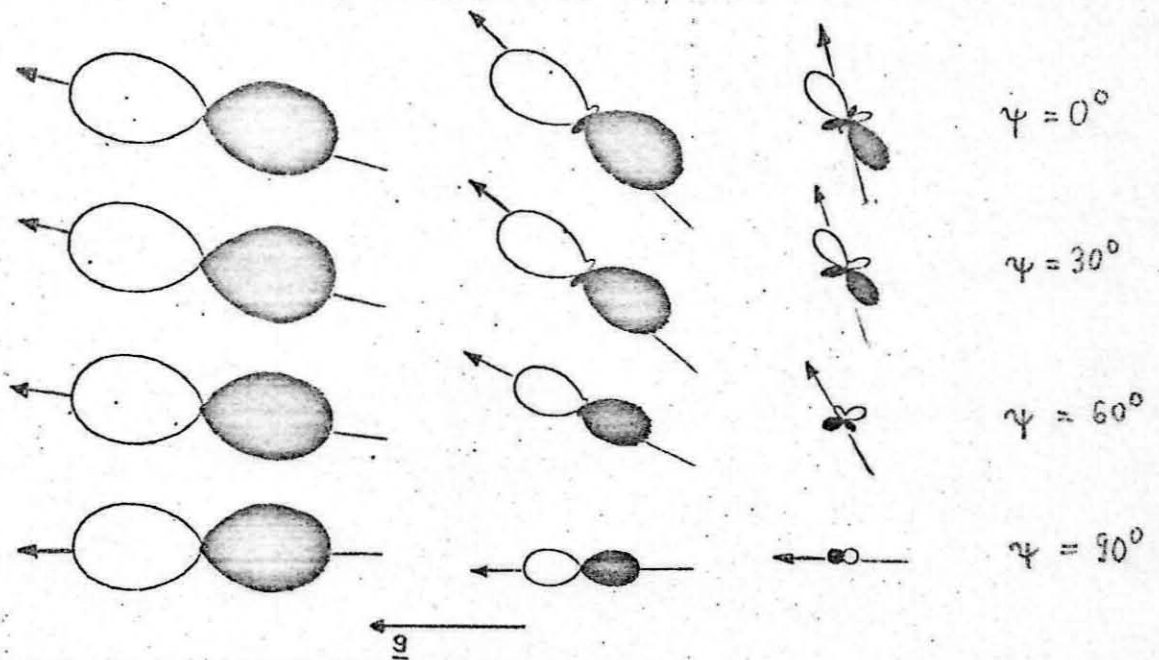


Fig. 2.10 Abhängigkeit der KF. von ψ . Die Projektionen von $\underline{m}$ auf die x-y-Ebene sind eingezeichnet.

2.3.5. Einige Bemerkungen zu "Schmetterlingen".

"Schmetterlinge" (siehe Fig. 2.3.) entstehen, wenn

- (1) $a_1 = a_3 = 0$; $b_1 \approx b_3 \neq 0$
- (2) $a_1 \approx a_3 \neq 0$; $b_1 = b_3 = 0$

Fall (1) ist ausgeschlossen, da nicht beide Koeffizienten gleichzeitig verschwinden können (vergleiche Fig. 2.7.).

Fall (2) ist möglich, es muß gelten:

$$n_x \beta_y + n_y \beta_x = 0$$

Behält man die in 2.3.1. eingeführten Winkel bei, ergibt sich:

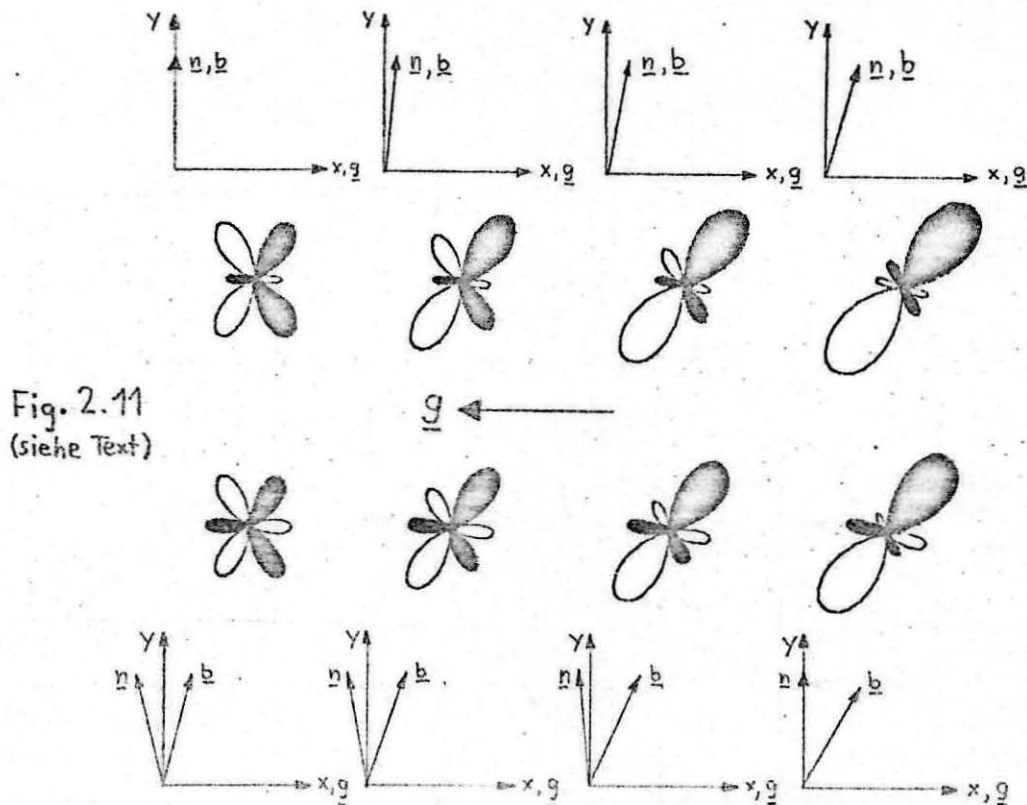
$$\begin{aligned} \cos \varphi \cos \psi \sin \chi + \cos \psi \cos \varphi \sin \chi &= 0 \\ \cos \psi (\sin (\varphi + \chi)) &= 0 \end{aligned}$$

Als Lösungen erhält man

$$\begin{aligned}\Psi &= 90^\circ; 270^\circ; \dots \quad (1) \\ \Psi + \chi &= 0^\circ; 180^\circ; \dots \quad (2)\end{aligned}$$

Bei Lösung (1) ist aber $a_1 \approx 0$; $a_3 \approx 0$, der Kontrast wird also verschwinden. Bei Lösung (2) entsteht für $\Psi + \chi = 0^\circ$ eine normale KF., da $a_1 \gg a_3$. Für $\Psi + \chi = 180^\circ$ entsteht der Schmetterlingskontrast. Man sieht, daß "Schmetterlinge" dann entstehen, wenn der mittlere Orientierungsvektor senkrecht zu $\underline{g}$ steht. (Dies gilt auch dann noch, wenn die einschränkende Bedingung $\underline{n}$, $\underline{b}$, $\underline{g}$ komplanar fallen gelassen wird.) Es ist deshalb eine zwar hinreichende, aber nicht notwendige Bedingung, daß sowohl $\underline{b}$ als auch $\underline{n}$ in der y-z-Ebene liegen müssen.

Sowohl bei **Frankschen** Versetzungsringen als auch bei Versetzungsringen mit Scherkomponenten ist der Schmetterlingskontrast außerordentlich empfindlich gegenüber Abweichungen von $(\Psi + \chi)/2$ aus der exakten 90° -Lage in Bezug auf $\underline{g}$.



Man entnimmt Fig. 2.11., daß das Auftreten von "Schmetterlingen" mit hoher Genauigkeit einen Versetzungsring mit $(\varphi + \chi)/2 = 90^\circ$ anzeigt. Außerdem ist zu sehen, daß Versetzungsringe mit Scherkomponenten auch hier in guter Näherung durch einen mittleren Orientierungsvektor beschrieben werden können.

2.3.6. Ersatz von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ durch einen mittleren Orientierungsvektor $\underline{m}$

Die in den vorhergehenden Abschnitten gefundenen Ergebnisse legen die Vermutung nahe, daß $\underline{n}$ und $\underline{b}$ zur Berechnung von KF. in guter Näherung durch den sogenannten mittleren Orientierungsvektor $\underline{m}$ ersetzt werden können. Dies bedeutet, daß man einen Versetzungsring mit Burgersvektor $\underline{b}_0$ und Normalenvektor $\underline{n}_0$ durch einen fiktiven Stufenring mit $\underline{b}_s = \underline{m}$ und $\underline{n}_s = \underline{m}$ ersetzt. Ob, und unter welchen Umständen diese Vermutung berechtigt ist, wird im folgenden Abschnitt gezeigt. Um in voller Allgemeinheit zu bleiben werden $\underline{n}$ und $\underline{b}$ abweichend von der Beschreibung in den vorhergehenden Abschnitten jetzt durch je 2 Winkel charakterisiert, und zwar soll gelten: ($\underline{n}_{pr}$, $\underline{b}_{pr}$ = Projektion von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ auf die x-y- Ebene.)

$$\varphi = \angle(\underline{g}, \underline{n}_{pr})$$

$$\chi = \angle(\underline{g}, \underline{b}_{pr})$$

$$\alpha = \angle(\underline{n}, \text{x-y-Ebene})$$

$$\beta = \angle(\underline{b}, \text{x-y-Ebene})$$

Dann gilt

$$\underline{n} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \varphi \\ \cos \alpha \sin \varphi \\ \sin \alpha \end{pmatrix}$$

$$\underline{b} = \begin{pmatrix} \cos \beta \cos \chi \\ \cos \beta \sin \chi \\ \sin \beta \end{pmatrix}$$

$$\underline{m} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\varphi + \chi}{2} \\ \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\varphi + \chi}{2} \\ \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \end{pmatrix}$$

Für eine einfachere Schreibweise führen wir noch die folgenden Abkürzungen ein

$$\Sigma \varphi = \varphi + \chi$$

$$\Sigma \alpha = \alpha + \beta$$

$$\Delta \varphi = \varphi - \chi$$

$$\Delta \alpha = \alpha - \beta$$

Mit $\underline{n}_0$ und $\underline{b}_0$ berechnete Terme	Mit $\underline{n}=\underline{m}$ und $\underline{b}=n$ berechnete Terme	Mit $\underline{m}$ berechnete Terme mult. mit $c = \frac{\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha}{1 + \cos \Sigma \alpha}$
$n_x \beta_x = \cos \varphi \cos \psi \cos \alpha \cos \vartheta$ $= \frac{1}{4} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot [\cos \Delta \varphi + \cos \Sigma \varphi]$	$m_x \cdot m_x = \cos^2 \frac{\alpha + \vartheta}{2} \cdot \cos^2 \frac{\varphi + \chi}{2}$ $= \frac{1}{4} [1 + \cos \Sigma \alpha] [1 + \cos \Sigma \varphi]$	$c \cdot m_x^2 = \frac{1}{4} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot [1 + \cos \Sigma \varphi]$
$n_y \beta_y = \cos \alpha \cos \vartheta \sin \varphi \sin \chi$ $= \frac{1}{4} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot [\cos \Delta \varphi - \cos \Sigma \varphi]$	$m_y \cdot m_y = \cos^2 \frac{\Sigma \alpha}{2} \sin^2 \frac{\Sigma \varphi}{2}$ $= \frac{1}{4} [1 + \cos \Sigma \alpha] [1 - \cos \Sigma \varphi]$	$c \cdot m_y^2 = \frac{1}{4} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot [1 - \cos \Sigma \varphi]$
$n_z \beta_z = \sin \alpha \sin \vartheta$ $= \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha - \cos \Sigma \alpha]$	$m_z \cdot m_z = \sin^2 \frac{\Sigma \alpha}{2}$ $= \frac{1}{2} [1 - \cos \Sigma \alpha]$	$c \cdot m_z^2 = \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$
$n_x \beta_y + \beta_x n_z$ $= \cos \alpha \cos \vartheta [\cos \varphi \sin \chi - \sin \varphi \cos \chi]$ $= \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha] [\sin \Sigma \varphi]$	$m_x m_y + m_y m_x$ $= \frac{1}{2} [1 + \cos \Sigma \alpha] \sin \Sigma \varphi$	$2 c m_x m_y = \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot \sin \Sigma \varphi$
$n_x \beta_x - n_y \beta_y$ $= \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha] \cdot \cos \Sigma \varphi$	$m_x \cdot m_x - m_y \cdot m_y$ $= \frac{1}{2} [1 + \cos \Sigma \alpha] \cdot \cos \Sigma \varphi$	$c [m_x^2 - m_y^2] = \frac{1}{2} [\cos \Delta \alpha + \cos \Sigma \alpha]$ $\cdot \cos \Sigma \varphi$

Falls die mit $\underline{m}$ berechneten a_i , b_i von den mit $\underline{n}$ und $\underline{b}$ berechneten nur wenig abweichen sollten, ist die Näherung berechtigt. Zur Berechnung ist die folgende Tabelle ein nützliches Hilfsmittel.

Mit den Definitionen von a_1 , a_3 , b_1 und b_3 (siehe 2.2.4.) und mit Hilfe der vorhergehenden Tabelle sieht man, daß

$$\begin{aligned} a_3 &= c a_3^* & \text{mit } a_i^*, b_i^* &= \text{Koeffizienten, die mit} \\ b_1 &= c b_1^* & \underline{m} &\text{errechnet werden.} \\ b_3 &= c b_3^* \end{aligned}$$

Die von $\Delta\alpha$ und $\Sigma\alpha$ abhängige Konstante c kann Werte zwischen 1,305 und 0,88 annehmen. (Für $\Sigma\alpha_{\max} = \pm 90^\circ$; $\Delta\alpha_{\max} = 45^\circ$). Man beschränkt sich also auf Winkel $\alpha, \beta \leq 45^\circ$. Diese Beschränkung ist sinnvoll, da für größere α, β kein Kontrast mehr zu erwarten ist. (Siehe 2.3.7.). $\Delta\alpha \leq 45^\circ$ heißt, daß man den maximalen Scherwinkel zu 45° annimmt. (Scherwinkel darüber hinaus sind unwahrscheinlich.) Soll die Näherung sinnvoll sein, muß auch die rechte Seite der folgenden Gleichung hinreichend klein sein:

$$\begin{aligned} a_1 - ca_1^* &= 1,5 (\cos\Delta\alpha + \cos\Sigma\alpha) (\cos\Delta\psi - 1) \\ &\quad - 0,4((1-f)\cos\Delta\alpha - (1+f)\cos\Sigma\alpha) \\ \text{mit } f &= (1 - \cos\Sigma\alpha)/(1 + \cos\Sigma\alpha) \end{aligned}$$

Bei der Auswertung dieser Formel muß man berücksichtigen, daß $\Delta\alpha$ und $\Delta\psi$ nicht unabhängig sind, sondern durch die Gleichung $\sin^2\Delta\alpha + \sin^2\Delta\psi = \sin^2\Theta$ (Θ = Scherwinkel) verknüpft sind. Um einen Überblick über die möglichen Werte von $a_1 - ca_1^*$ zu erhalten, ist es sinnvoll, für die möglichen Extremwerte eine Tabelle anzulegen.

$\Theta = 45^\circ$	$a_1 - ca_1^*$			
	$\Delta\alpha = 0^\circ; \Delta\psi = 0^\circ$	$\Delta\alpha = 45^\circ; \Delta\psi = 0^\circ$	$\Delta\alpha = 0^\circ; \Delta\psi = 45^\circ$	$\Delta\alpha = 30^\circ; \Delta\psi = 30^\circ$
$\Sigma\alpha = 0^\circ$	0	0,117	- 0,879	- 0,375
$\Sigma\alpha = 45^\circ$	0	0,097	- 0,75	- 0,276
$\Sigma\alpha = 90^\circ$	0	0	- 0,439	- 0,174

Man entnimmt dieser Tabelle, daß die größte Abweichung für $\Delta\psi = 45$; $\Delta\alpha = \Sigma\alpha = 0^\circ$ auftritt, d.h. wenn $\underline{g}$, $\underline{b}$, $\underline{n}$ in der x - y -Ebene liegen. Die Frage ist, ob diese maximale Abweichung von 0,879 im Wert von ca_1^* trotz der korrekten anderen Koeffizienten ausreichen kann, um die Ersetzung von $\underline{n}$ und $\underline{b}$ durch $\underline{m}$ untragbar werden zu lassen. Deshalb wurden die KF. von Fig. 2.8. mit dem mittleren Orientierungsvektor noch einmal berechnet. Den Vergleich mit den exakten und den sich aus $\underline{m}$ ergebenden KF. zeigt Fig. 2.12. Man sieht, daß auch im Falle größter Abweichung die Übereinstimmung ausreichend gut ist.

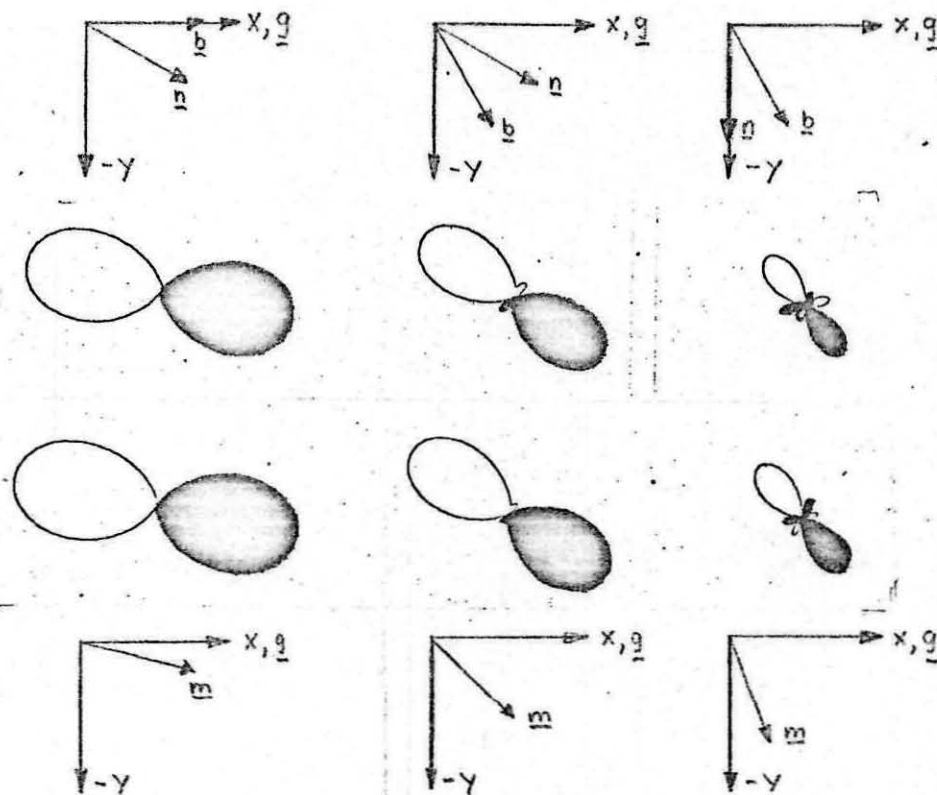


Fig. 2.12. Vergleich von korrekt und mit $\underline{m}$ gerechneten KF.

Als weiteren Beleg für die Güte der Näherung können auch die Bilder aus Fig. 2.11. dienen, bei denen die für einen Stufenring gerechneten KF. auch als KF. zum mittleren Orientierungsvektor der entsprechenden Ringe mit Scherkomponenten aufgefaßt werden können.

2.3.7. Verschwinden des Kontrasts

Damit in der 1. Bornschen Näherung der Kontrast verschwindet, müßten alle $a_i, b_i = 0$ werden. Diese Bedingung ist i.a. nicht erfüllbar. In der Praxis genügt eine nicht so weit gehende Forderung. Auf dem photographischen Negativ wird ein S-W-Kontrast dann nicht mehr eindeutig zu erkennen sein, wenn er eine bestimmte Größe unterschreitet. Dies hängt auch damit zusammen, daß - obwohl es in den Formeln nicht zum Ausdruck kommt - mit schwindender Größe auch der Gesamtkontrast kleiner wird (beispielsweise gemessen als Differenz der Intensität im hellsten und dunkelsten Teil des S-W-Kontrastes.) So ergeben z.B. die in Fig. 2.10. berechneten KF. vom Typ B_1 und C_1 für $\psi \gg 60^\circ$ wahrscheinlich keinen erkennbaren Kontrast mehr. Die Forderung für verschwindenden Kontrast muß also lauten: a_i, b_i genügend klein

Diese Forderung ist dann erfüllbar, wenn $\underline{n}$ und $\underline{b}$ merkbare z-Komponenten haben. Betrachtet man der Einfachheit halber den mittleren Orientierungsvektor $\underline{m}$, so ergeben sich mit

$$\underline{m} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \varphi \\ \cos \alpha \sin \varphi \\ \sin \alpha \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \alpha &= \angle (\underline{m}, x-y\text{-Ebene}) \\ \varphi &= \angle (\underline{m}_{pr}, \underline{z}) \end{aligned}$$

die Koeffizienten

$$a_1 = \cos^2 \alpha (6,5 - 4\sqrt{2}) \cos^2 \varphi + (4\sqrt{2} - 0,5) \sin^2 \varphi + (4\sqrt{2} - 2) \tan^2 \alpha$$

$$a_3 = \cos^2 \alpha a_3^{(0)}$$

$$b_1 = \cos^2 \alpha b_1^{(0)}$$

$$a_i^{(0)}, b_i^{(0)} = \text{Koeffizienten für } \alpha = 0^\circ$$

$$b_3 = \cos^2 \alpha b_3^{(0)}$$

a_1 ist nun immer kleiner oder gleich $a_1^{(0)}$. Da a_1 für $\psi \lesssim 60^\circ$ der hauptsächlich die Größe bestimmende Koeffizient ist, wird die Größe der immer mit $q'/|\Delta L| = 1$ berechneten KF. sogar schneller abnehmen als mit $\cos^2 \alpha$. Dies führt zu dem

Ergebnis, daß der Kontrast praktisch dann verschwunden ist, wenn der mittlere Orientierungsvektor Winkel $\geq 50^\circ$ mit der x- y- Ebene bildet.

2.3.8. Schwarz - Weiß - Vektor l

In den vorhergehenden Abschnitten wurde mehrmals gefunden, daß der S-W-Vektor l ungefähr parallel zur Projektion von m auf die x- y- Ebene verläuft. Die Gültigkeit dieser Regel soll im folgenden untersucht werden.

Da l nur dann ohne allzugroße Willkür definierbar ist, wenn die KF. normal oder nur leicht gestört sind, d.h. wenn a_3 und b_3 hinreichend klein gegenüber a_1 und b_1 sind, gilt für den Winkel φ^0 , den der S-W-Vektor mit g bildet in erster Näherung

$$\varphi^0 = \arctan \frac{b_1}{a_1}$$

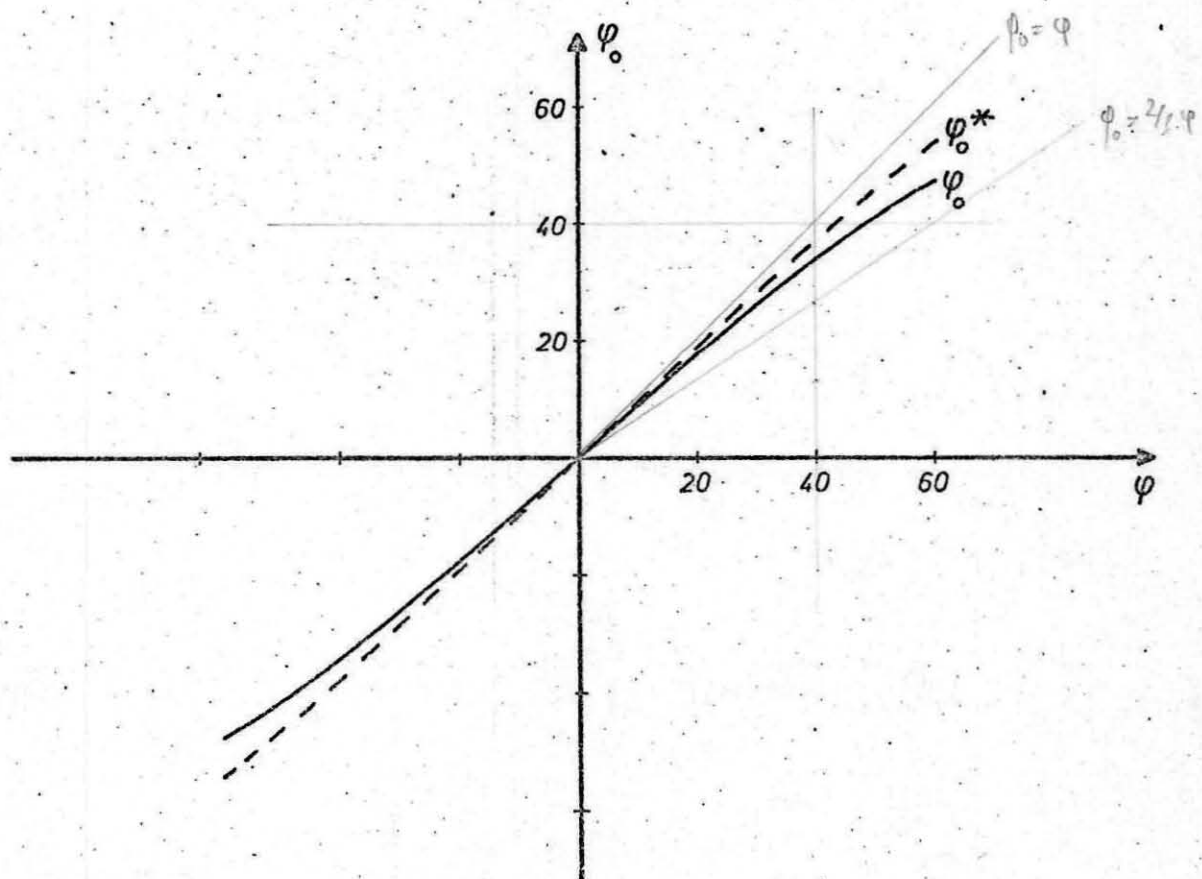


Fig. 2.13. Abhängigkeit des Winkels zwischen l und g von φ

Errechnet man einerseits ψ^0 mit b_1, a_1 , andererseits mit b_1^*, a_1^* so ergibt sich, das vorstehende Diagramm (Fig. 2.13. für $\alpha, \beta = 0$; d.h. $\underline{n}, \underline{b}$ in der x- y- Ebene.)

Man erkennt, daß der S-W-Vektor für $\angle(\underline{m}, \underline{g}) \leq 60^\circ$ in guter Näherung durch $\underline{m}$ gegeben ist. Dies gilt jedoch nur im Rahmen der hier verwendeten Näherung. So wird z.B. in /4/ für Stufenringe mit $\angle(\underline{g}, \underline{b}) = 60^\circ$ nur ein ψ^0 von 35° errechnet. Auch kann sich bei Berücksichtigung der elastischen Anisotropie eine merkliche Verschiebung des S-W-Vektors ergeben /21/.

2.3.9. Berechnung von KF. in Zwischenschichten

Nach 2.2.5. galt für die KF. ($q''/|\Delta I| = 1$ gesetzt)

$$q = (3 - 4\nu)a_2 + a_2 \cos 2\psi + b_2 \sin 2\psi$$

$$a = n_x \beta_z + n_z \beta_x$$

$$b = -(n_y \beta_z + n_z \beta_y).$$

Man erkennt, daß entweder $\underline{b}$ oder $\underline{n}$ eine merkliche z-Komponente haben müssen, um überhaupt einen erkennbaren Kontrast zu erhalten. Fig. 2.14. zeigt die für Kobalt errechneten KF. wie sie für Orientierungen der Folie nahe $\{11\bar{2}2\}$ auftreten.

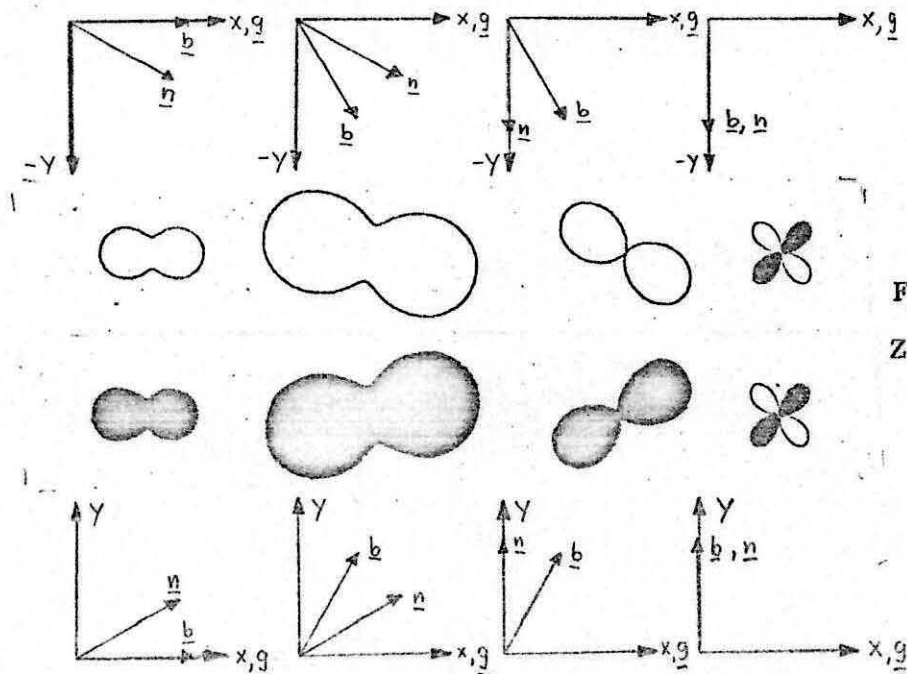


Fig. 2.14. KF. in Zwischenschichten