

Blubb

MOIRE-PATRONEN EN DIFFUSIE

door

T. van Dijk

augustus 1975

MOIRE-PATRONEN EN DIFFUSIE

door

T. van Dijk

augustus 1975

Bellum est sua vitia nosse

(Cicero)

Allen, die op enigerlei wijze een bijdrage hebben geleverd aan mijn
in dit verslag beschreven onderzoek, betuig ik mijn oprechte dank.

Mijn afstudeerwerk, vertegenwoordigd door dit verslag, werd verricht in het laboratorium voor Metaalkunde van de Technische Hogeschool Delft in de sectie Structuur van de Vaste Stof van de vakgroep Fysische en Chemische Metaalkunde.

Afstudeerdocent: Prof.dr.ir. B. Okkerse

Naaste begeleiders: Ir. E.J. Mittemeijer, Ir. R. Delhez, Dr. F.W. Schapink

INHOUD

INLEIDING EN SAMENVATTING	(-1)-0
I DE GEOMETRIE VAN ZUIVERE MOIRE-PATRONEN	1 - 6
I-1 Zuivere Moiré-Patronen	1
I-2 Parallel-Moiré-Patronen	1 - 2
I-3 Rotatie-Moiré-Patronen	2 - 3
I-4 Het effect van een rotatie op Parallel-Moiré-Patronen	3 - 4
I-5 Tilt-Moiré-Patronen	4
I-6 Moiré-Patronen en Roosterfouten	5
Literatuur	6
II DIFFRACTIECONTRAST VAN ZUIVERE MOIRE-PATRONEN	7 -18
II-1 Beschrijving van het Model	7
II-2 Toepassen van de Kinematische Diffractietheorie	7 -11
II-3 Toepassen van de Dynamische Diffractietheorie	11-17
II-3a Inleiding	11-13
II-3b Dynamische Theorie van Moiré-Patronen	13-16
II-3c Invloed van de Anomale Absorptie	16-17
Literatuur	18
III MOIRE-PATRONEN NA DIFFUSIE	19-36
III-1 Beschrijving van het Model	19-20
III-2 Toepassen van de Kinematische Theorie	20-23
III-3 Toepassen van de Dynamische Theorie	24-31
III-3a Numerieke oplossing van de Howie-Whelan-vergelijkingen, voor het tweestraalsgeval	24-27

III-3b Toepassing van de Numerieke Methode	27-30
III-3c Discussie aangaande de Simulatie- resultaten	30-31
III-4 Ons Model: de Gemiddelde-Rooster-Benadering	31-35
Literatuur	36
IV BESCHRIJVING VAN DE EXPERIMENTEN	37-43
IV-1 Inleiding	37
IV-2 Het Electropolijsten van Nikkel	37-38
IV-3 Het Epitactisch Opdampen van Koper	38-39
IV-4 Alternatieve Prepareermethoden voor Doorstraal- bare Epitactische Bikristallen	39-47
IV-5 Het Waarnemen van de Preparaten in de Elec- tronenmicroscop	40-42
Literatuur	43
V RESULTATEN VAN DE EXPERIMENTEN	44-54
V-1 Het Opmeten van de Moiré-Patronen	44
V-2 Resultaten van de Metingen	44-45
V-3 Discussie	45-53
V-3a Reproduceerbaarheid van de Waarnemingen	45-49
V-3b De Moiré-spatie als Functie van de Diffusieduur	49-50
V-3c Berekening van Bulkdiffusiecoëfficiënten uit de Experimentele Gegevens	50-52
V-3d Conclusie	53
Literatuur	54

APPENDIX A EEN KORT OVERZICHT VAN DE VERSCHILLENDE BESCHRIJVINGSWIJZEN IN DE DYNAMISCHE DIFFRACTIE- THEORIE	A-1 - A-6
APPENDIX B OPLOSSING VAN DE HOWIE-WHELAN-VERGELIJKINGEN VOOR EEN PERFECT KRISTAL, ONDER VERWAARLOZING VAN ANOMALE ABSORPTIE	B-1 - B-6
APPENDIX C BEREKENING VAN HET CONTRAST VAN ZUIVERE MOIRE- PATRONEN	C-1 - C-8
APPENDIX D OPLOSSING VAN DE HOWIE-WHELAN-VERGELIJKINGEN VOOR EEN PERFECT KRISTAL, REKENING HOUDEND MET ANOMALE ABSORPTIE	D-1 - D-5

INLEIDING EN SAMENVATTING

Met de electronenmicroscopie kunnen aan een epitactisch bikristal moiré-patronen worden waargenomen.

In dit verslag worden de resultaten gepresenteerd van een onderzoek naar de verandering van de moiré-patronen, indien in een dergelijk epitactisch bikristal interdiffusie plaats vindt.

Het is duidelijk, dat, alvorens de veranderingen in het moiré-patroon (letterlijk en figuurlijk) onder de loep kunnen worden genomen, het begrip "moiré-patronen" eerst een grondig theoretisch fundament behoeft. Dit theoretisch fundament komt aan de orde in de hoofdstukken I en II, waarin zuivere (d.w.z. niet door diffusie genodificeerde) moiré-patronen worden belicht van geometrische zijde (hoofdstuk I) en van diffractie-theoretische zijde (hoofdstuk II). In hoofdstuk II en in enige appendices wordt een inleiding gegeven tot een speciale oplossingsmethode voor de Howie-Whelanvergelijkingen.

De modificaties van moiré-patronen ten gevolge van interdiffusie, waarover in de bestaande literatuur nog nimmer iets is vermeld, worden besproken in hoofdstuk III. Onze numerieke berekeningen tonen primair aan dat de spatie van moiré-patronen wordt verbreed ten gevolge van diffusie. Zonder een gedetailleerde kennis van de kristallografie van de diffusiezone (distributie van misfit-dislocaties) kunnen geen gedetailleerde conclusies getrokken worden. Mede hierom ontwikkelden wij een geheel nieuw model (beschreven in § III-4) dat op basis van een "gemiddelde-rooster-benadering" een kwantitatieve beschrijving geeft van de verandering van de spatie van de moiré-patronen als functie van de diffusiecoëfficiënt, de diffusieduur en de dikten der samenstellende delen van het diffusiekoppel.

In hoofdstuk IV wordt beschreven op welke wijze de preparaten bereid werden, waaraan wij onze theorie zouden kunnen verifiëren.

De resultaten van onze experimenten zijn beschreven in hoofdstuk V. Deze resultaten blijken uitstekend in overeenstemming te zijn met de "gemiddelde-rooster-benadering".

Bij drie temperaturen (450, 500 en 550)^oC werd uit de experimentele gegevens de interdiffusiecoëfficiënt in het systeem Cu/Ni bepaald. De gevonden waarden voor D_0 en activeringsenergie tonen aan, dat onze methode inderdaad realistische bulkdiffusiecoëfficiënten oplevert.

uitkomst van de proef

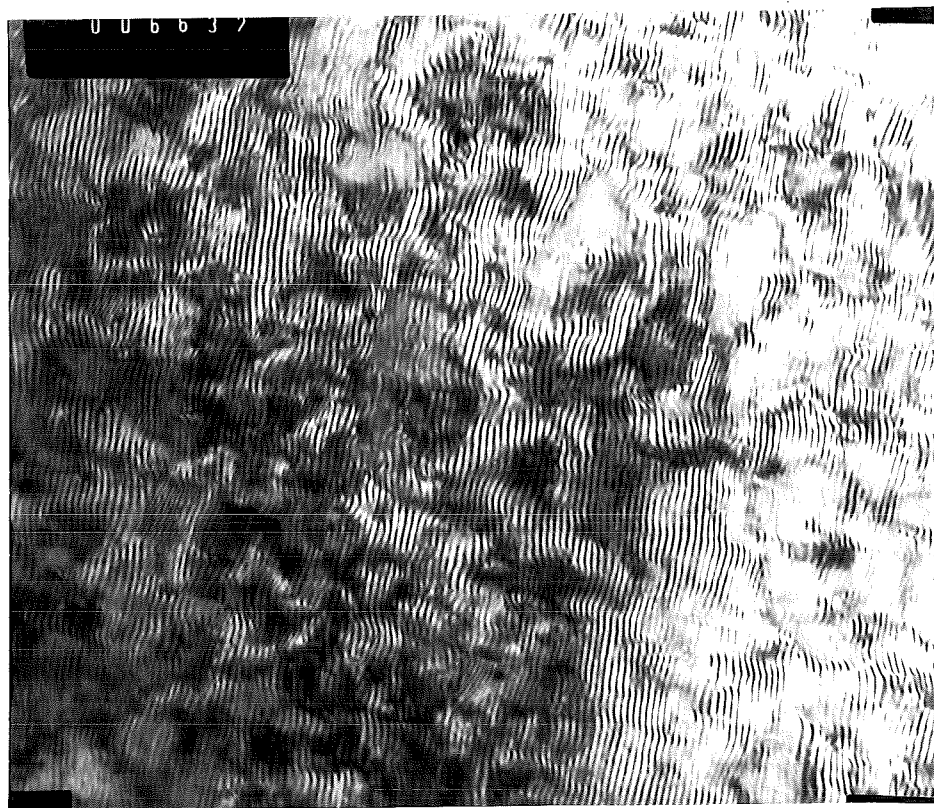
unvervalsijed! Hiermee hebben we aangetoond dat ons model een krachtige nieuwe methode oplevert om bulkdiffusiecoëfficiënten bij lage temperaturen in zeer dunne folies te bepalen.

Opmerking: In de loop van het onderzoek zijn honderden foto's gemaakt van moiré-patronen, zowel vóór als ná diffusie.

Aan deze foto's is weliswaar veel meetwerk verricht, maar opname van de foto's zou de tekst van dit verslag zeker niet verduidelijken. Het enige, dat werkelijk van belang is, zijn de resultaten verkregen na bepaalde middelings-procedures, zoals die zijn weergegeven in de tabellen van hoofdstuk V.

Toch willen wij u een voorbeeld van een moiré-patroon niet onthouden; daarom laten wij hier een 220-moiré-patroon zien (theoretische spatie: 49.38 \AA) van een systeem bestaande uit een Ni-laag van 1000 \AA en een Cu-laag van ca. 435 \AA .

De vergroting is $176.400x$; dit betekent dat 1 mm op de foto overeenkomt met 56.7 \AA .



1. DE GEOMETRIE VAN ZUIVERE MOIRÉ-PATRONEN.

1-1. Zuivere Moiré-Patronen

Met de term "zuivere moiré-patronen" worden moiré-patronen bedoeld, die geen verandering (in spatie en/of contrast) hebben ondergaan ten gevolge van de aanwezigheid van een eindig dikke tussenlaag (diffusie-zône) tussen de beide delen van het bikristal, waaraan zij kunnen worden waargenomen.

?
Moiré-patronen zijn roosterfringes, die zichtbaar gemaakt kunnen worden door beeldvorming met twee bundels [1, 2, 3]. Helderveld-moiré-patronen worden gevormd door de doorgaande bundel in combinatie met een dubbelgediffracteerde bundel; donkerveld-moiré-patronen door combinatie van twee "bij elkaar behorende" primaire reflecties aan elk van de afzonderlijke delen van het bikristal. Voorwaarde voor de vorming van moiré-patronen is natuurlijk dat de bedoelde bundels beide door het objectiefdiafragma gaan.

1-2. Parallel-Moiré-Patronen

In fig. 1. is schematisch een bikristal weergegeven, waaraan parallel moiré-patronen kunnen worden waargenomen. De kristallen A en B zijn beide f.c.c.; hun respectievelijke roosterconstanten zijn a_1 en a_2 . Zij liggen onder elkaar, zodanig dat de vectoren van de respectievelijke eenheids-cellen evenwijdig zijn. De invallende elektronenbundel staat loodrecht op het bovenvlak van A, het grensvlak A/B en de onderkant van B.

Omdat de golflengte van 100kV electronen erg klein is ($\pm 0.04 \text{ \AA}$) zijn de Bragg-hoeken ook erg klein (ongeveer 1°). Dit betekent, dat de diffracterende vlakken, zowel in A als in B vrijwel evenwijdig zijn met de invallende bundel. Als de invallende bundel evenwijdig is met [111] gaat een gedeelte van de $(\bar{2}20)$ -bundel van kristal A ongediffracteed door kristal B. In het diffractiepatroon (fig. 2a) wordt deze bundel voorgesteld door het reciproke roosterpunt P. Een ander gedeelte van de $(\bar{2}20)$ -bundel van kristal A kan echter gediffracteed worden door de $(\bar{2}20)$ -vlakken van kristal B. Het resultaat hiervan is het optreden van een dubbeldiffractiestip S in het diffractiepatroon van fig. 2a.

*alleen bij
twijfel v.
fig 2 a, die
in blauw
niet gevonden
wordt*

Als de bol van Ewald plat wordt verondersteld - dit is bij 100kV electronendiffractie een goede benadering - geldt:

$$OS = PS - OP = \frac{K}{d_2} - \frac{K}{d_1} \quad (1.1)$$

Hierin is K de diffractiecameraconstante en zijn d_1 en d_2 de netvlakafstanden van de $(2\bar{2}0)$ -vlakken van respectievelijk de kristallen A en B. Ofwel:

$$|\underline{\Delta g}| = |g_2 - g_1| \quad (1.3)$$

$$\underline{\Delta g} // g_1 \text{ en } g_2$$

De plaats van de dubbeldiffractiestip S is dus dezelfde als van een diffractiestip ten gevolge van diffractie aan een vlakkenschaar met spatie:

$$M_{\text{par}} = \frac{d_1 d_2}{|d_1 - d_2|} \quad (1.2)$$

Het moiré-patroon is een afbeelding van deze vlakkenschaar, ook wel het coïncidentierooster van A en B genoemd.

De fringes staan loodrecht op de diffractievector $\underline{\Delta g}$ en voor parallel-moiré-patronen dus ook loodrecht op g_1 en g_2 . In fig. 2b is het dubbeldiffractieprocédé toegepast op de overige reflecties van het $2\bar{2}0$ -type, benevens op de in aanmerking komende 422 -reflecties. Alleen dubbeldiffractiestippen dicht bij de oorsprong en de primaire reflecties worden getoond.

Het is duidelijk, dat een dergelijk diffractiepatroon aanleiding geeft tot een complex moiré-patroon, waarin verscheidene richtingen en spaties voorkomen. In de praktijk is echter het moiré-patroon van één stippenpaar veelal dominant. Het helderveld-moiré-patroon is dan te beschrijven als de interactie tussen de doorgaande en één dubbelgediffracteerde bundel, terwijl het donkerveld-moiré-patroon bepaald wordt door de twee primaire reflecties.

1-3. Rotatie-Moiré-Patronen

Thans wordt een bikristal van de zuivere stof A beschouwd, waarvan het bovenste gedeelte (A_1) t.o.v. het onderste gedeelte (A_2) over een hoek α verdraaid is.

De geometrie voor diffractie is als in fig. 1. Op een wijze analoog aan die beschreven in § 1-3 worden naast de primaire $2\bar{2}0$ -reflecties (P en Q) in het diffractiepatroon ook dubbeldiffractiestippen waargenomen (fig. 2c)

De positie van de dubbeldiffractiestip S wordt gegeven door:

$$OS = \frac{2K}{d} \sin \frac{1}{2} \alpha \quad (1.4)$$

Voor kleine α geldt:

$$OS \approx \frac{K\alpha}{d} \quad (1.5)$$

De positie van de dubbeldiffractiestip S is dus die, welke verwacht zou worden van een reflectie aan een vlakkenschaar met spatie:

$$M_{\text{par}} = \frac{d}{\alpha} \quad (1.6)$$

Ofwel:

$$|\Delta g| = \alpha |g| \quad (1.7)$$

$$\underline{\Delta g} \perp \underline{g}_1 \text{ en } \underline{g}_2$$

Beeldvorming met de doorgaande bundel en de dubbelgediffracteerde bundel S geeft dus een helderveld-rotatie-moiré-patroon, dat loodrecht staat op OS. Uit de constructie van fig. 3 blijkt, dat rotatie-moiré-patronen eveneens kunnen worden opgevat als het coïncidentierooster van de overlappende kristallen; immers:

$$M = \frac{d}{2 \sin \frac{1}{2} \alpha} \approx \frac{d}{\alpha}$$

1-4. Het effect van een rotatie op Parallel-Moiré-Patronen

In fig. 4 is P de primaire reflectie van het bovenliggende kristal ($OP = K/d_1$) en Q de primaire reflectie van het onderliggende kristal ($OQ = K/d_2$). Door dubbeldiffractie wordt een dubbeldiffractiestip S gegenereerd.

Bij een rotatie van het tweede kristal over een hoek θ roteert het diffractiepatroon van het tweede kristal over dezelfde hoek (de uitkomsten van de nu volgende berekening zijn identiek bij rotatie van het eerste kristal). De nieuwe positie van Q wordt Q' en de nieuwe positie van S wordt S'. Omdat de richting van de fringes altijd loodrecht staat op de ervoor verantwoordelijke diffractievector, roteren de fringes over een hoek ω . Als θ en ω klein zijn geldt:

$$\text{tg } \theta \approx \theta \approx \frac{QQ'}{OQ} = \frac{SS'}{OQ} = SS' \cdot d_2 / K \quad (1.8)$$

$$\text{tg } \omega \approx \omega \approx \frac{SS'}{OS} = \frac{SS' \cdot d_1 d_2}{K(d_1 - d_2)} \quad (1.9)$$

Uit (1.8) en (1.9) volgt:

$$\omega = \frac{d_1}{d_1 - d_2} \theta \quad (1.10)$$

De verdraaiing van de moiré-patronen is dus een vergroting van de verdraaiing van de overlappende kristallen. Voor kleine rotaties geldt:

$$OS' = \frac{OS}{\cos \omega} \quad (1.11)$$

Zodat voor de spatie van een gecombineerd parallel-rotatie-moiré-patroon kan worden geschreven:

$$M_{\text{par, rot}} (\approx 1/|OS'|) = \frac{d_1 d_2 \cos \omega}{d_1 - d_2} \quad (1.12)$$

1-5. Tilt-Moiré-Patronen

Tilt-moiré-patronen ontstaan als de beide delen van een bikristal ten opzichte van elkaar gekanteld zijn om een as, die niet in het vlak, opgespannen door de richtingen van invallende bundel en diffractievector, is gelegen [4].

Voor ons onderzoek zijn tilt-moiré-patronen niet van belang en er wordt derhalve mee volstaan, op hun bestaan te wijzen.

1-6. Moiré-Patronen en Roosterfouten

Roosterfouten, die in de beide overlappende kristallen aanwezig zijn, verstoren de periodieke structuur van het coïncidentierooster en kunnen onder bepaalde omstandigheden in het moiré-patroon worden waargenomen. De aanwezigheid van dislocaties kan in moiré-patronen zichtbaar zijn in de vorm van extra halfvlakken in het coïncidentierooster [3, 5, 6]. De verschijnselen worden in de oude literatuur dan meestal geïllustreerd aan de hand van de analogie met de buiging van licht aan twee overlappende optische tralies.

Literatuur

- [1] Dowell, W.C.T., Farrant & J.L. Rees, A.L.G.
Proc. 3rd Int. Conf. on Electron Microsc., London 1954 (Londen, 1956)
- [2] Dowell, W.C.T., Farrant, J.L. & Rees, A.L.G.
Proc. reg. Conf. on Electron Microsc., Tokyo 1956 (Tokio, 1957)
- [3] Bassett, G.A., Menter, J.W. & Pashley, D.W.
Proc. Roy. Soc. A 246, 345 (1958)
- [4] White, J.R.
J. Appl.Phys. 45, 588 (1974)
- [5] Hashimoto, H. & Uyeda, R.
Acta Cryst. 10, 143 (1957)
- [6] Pashley, D.W., Menter, J.W. & Bassett, G.A.
Nature 179, 752 (1957)

FIGUREN BIJ HOOFDSTUK I

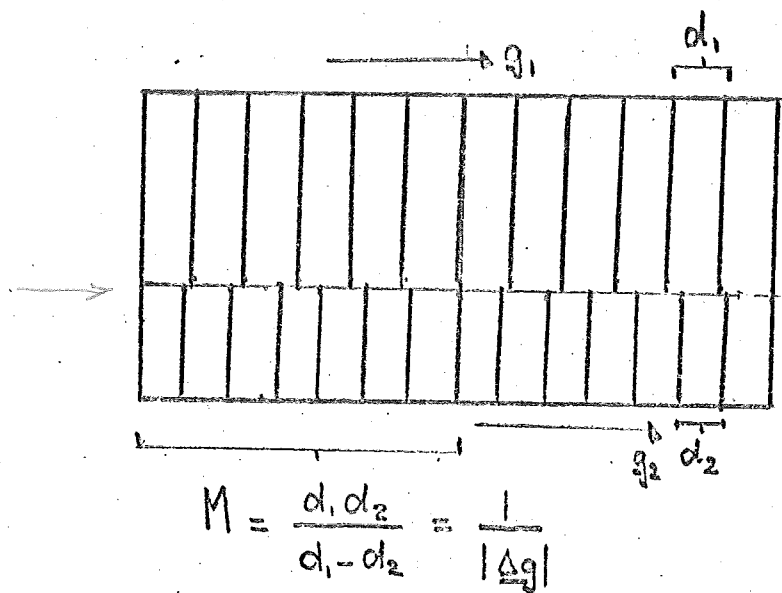


Fig. 1 Schematische Afbeelding van een Epitactisch Bikristal

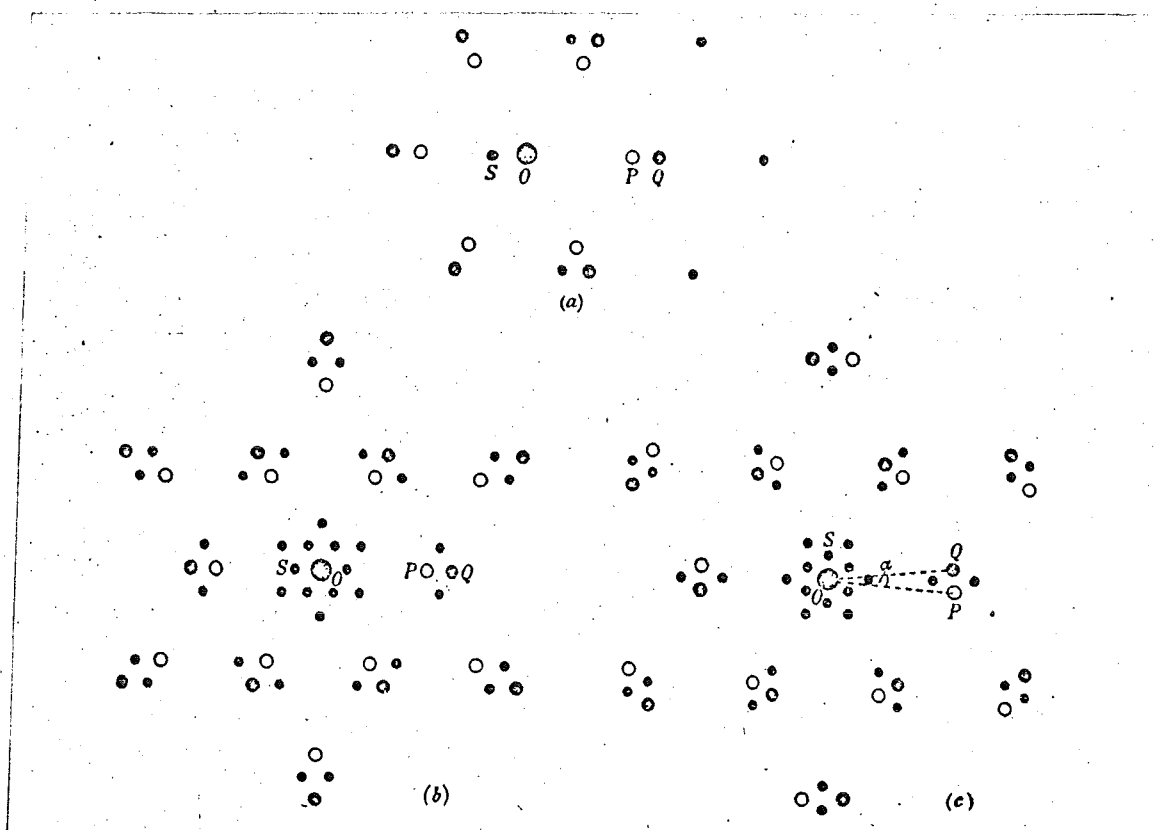


Fig. 2 Geometrie van de Dubbel diffractie.
 De grote open en gesloten cirkels stellen primaire diffractiestippen voor; de kleine cirkeltjes zijn dubbel diffractiestippen
 a en b: parallel geval; c: rotatiegeval

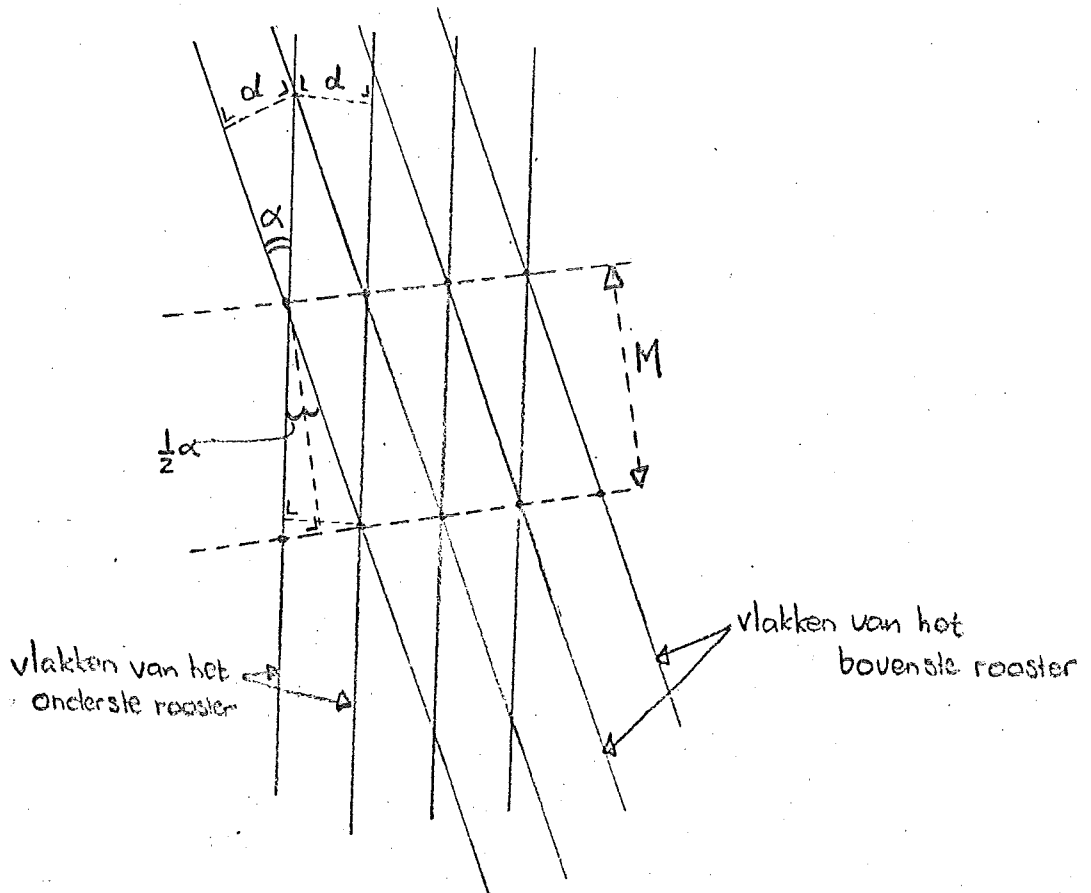


Fig. 3 Het Coïncidentierooster voor het Rotatiegeval

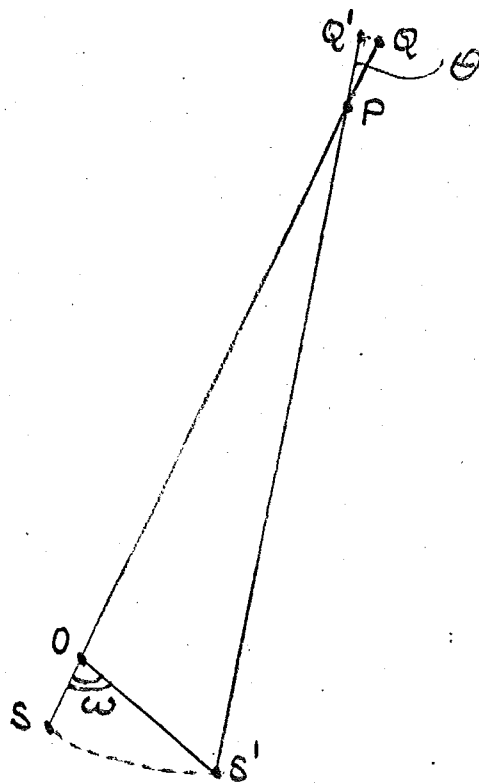


Fig 4 Het Effect van een Rotatie op Parallel-Moiré-Patronen

II. DIFFRACTIECONTRAST VAN ZUIVERE MOIRÉ-PATRONEN

Opmerking: Hoewel er verschillende typen moiré-patronen zijn (zie hoofdstuk I), zullen we ons in het vervolg uitsluitend bezig houden met parallel-moiré-patronen.

II-1. Beschrijving van het Model

Alvorens een begin te maken met de berekeningen, zal hier eerst uiteengezet worden op welk model de berekeningen gegrond zijn (zie fig. 1).

Kort gezegd komt het model erop neer, dat kristal 2 dient te worden beschouwd als een deformatie van kristal 1. De basisgedachte is, dat de primair door kristal 1 en kristal 2 gediffracteerde bundels samen als één gediffracteerde bundel (donkerveld-moiré-patroon) de doorgaande en de dubbelgediffracteerde bundel samen als één doorgaande bundel (helderveld-moiré-patroon) worden beschouwd. In de kolombenadering komt dat neer op een deformatie van de kolom, zoals die in kristal 1 gedacht moet worden. De richting van de kolom is altijd de richting van de gediffracteerde bundel.

Zouden we op grond van de zich tot in kristal 2 uitgestrekt gedachte periodiciteit van kristal 1 een bepaalde elementaircel n verwachten op een positie, gedefinieerd door plaatsvector \underline{r}_n , de aard van de verstoring brengt met zich mee, dat deze elementaircel, zich bevindend in kristal 2, in werkelijkheid moet worden gezocht op de positie, gedefinieerd door plaatsvector $\underline{r}_n + \underline{R}_n$; de verplaatsingsvector \underline{R}_n heeft een component \underline{R} , gelegen in het grensvlak tussen de kristallen 1 en 2. Zoals dat gebruikelijk is, nemen we aan dat de bundel loodrecht invalt op het oppervlak van kristal 1. \underline{R} is dan geen functie van z .

II-2. Toepassen van de Kinematische Diffractietheorie

Het diffractiecontrast bij imperfecte kristallen vinden we door de vergelijking voor de amplitude van de gediffracteerde bundel voor een perfect kristal, zoals die kan worden afgeleid m.b.v. een Fresnel-zône-constructie, te generaliseren.

De Fresnel-zôneconstructie legt ook de grondslag voor de in de diffractietheorie veelvuldig met succes toegepaste kolombenadering [1].

Als een bundel electronen loodrecht invalt op het oppervlak van een perfect kristal, dan is de bijdrage van elk vlak, evenwijdig aan het oppervlak van het kristal, tot de amplitude van de doorgaande bundel.

$$\Delta\phi_g = \frac{i \pi a}{\xi_g} e^{-2\pi i \underline{K}' \cdot \underline{r}_n} \quad (11.1)$$

In (1.1) is:

a : de spatie van de vlakken evenwijdig aan het oppervlak.

ξ_g : de extinctieafstand voor de reflectie g .

$\underline{K}' = \underline{g} + \underline{s}$, waarin \underline{g} de diffractievector is, en \underline{s} de vector, die de afwijking van de Braggstand beschrijft.

\underline{r}_n : de plaatsvector van elementaircel n in de kolom.

Om de diffractie aan imperfecte kristallen te beschrijven, wordt vergelijking (11.1), die, zoals vermeld, geldt voor een perfect kristal gegeneraliseerd tot:

$$\Delta\phi_g = \frac{i \pi a}{\xi_g} e^{-2\pi i \underline{K}' \cdot \underline{r}'_n} \quad (11.2)$$

Nu is \underline{r}'_n de plaatsvector van elementaircel n in het gedeformeerde kristal, die we ons opgebouwd kunnen denken als de vectorsom van \underline{r}_n , de plaatsvector, indien geen deformatie aanwezig was en een deformatievector \underline{R}_n .

Dus:

$$\underline{r}'_n = \underline{r}_n + \underline{R}_n \quad (11.3)$$

Als de kolombenadering mag worden toegepast, en dat mag alleen als \underline{R}_n slechts weinig varieert in richtingen loodrecht op de kolom, kan de amplitude van de gediffracteerde bundel worden verkregen door sommering van (11.2) over alle vlakken met spatie a , evenwijdig aan het oppervlak.

Omdat evenwel de spatie a zeer klein is t.o.v. de dikte van het kristal kan de som worden vervangen door een integraal. Men vindt:

$$\phi_g = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^z e^{-2\pi i \underline{K}' \cdot \underline{r}'} dz \quad (11.4)$$

Met (11.3) en $\underline{K}' = \underline{g} + \underline{s}$ volgt, als bedacht wordt dat $\underline{g} \cdot \underline{r}_n$ een geheel getal is en dat $\underline{s} \cdot \underline{R}_n$ klein is en verwaarloosd kan worden t.o.v. de overige termen:

$$\phi_g = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^z e^{-2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}} e^{-2\pi i \underline{s} \cdot \underline{z}} dz \quad (11.5)$$

De afwijking van de perfecte structuur komt dus tot uiting in het optreden van een extra fasefactor $e^{-2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}}$

Tot dusver werd de verstoring in het imperfecte kristal beschreven met de verplaatsingsvector \underline{R} . Een andere opvatting is, de verstoring op te vatten als een plaatselijke verandering van oriëntatie en spatie van het reciproke rooster. Men kan nu in het gedeformeerde rooster een plaatsafhankelijke reciproke roostervector $\underline{g}' = \underline{g} + \underline{\Delta g}$ definiëren, zodanig dat:

$$\underline{g}' \cdot \underline{r}'_n = \underline{g} \cdot \underline{r}_n \quad (11.6)$$

Met (1.3):

$$(\underline{g} + \underline{\Delta g}) (\underline{r}_n + \underline{R}_n) = \underline{g} \cdot \underline{r}_n$$

zodat bij goede benadering geldt:

$$\underline{g} \cdot \underline{R}_n = -\underline{\Delta g} \cdot \underline{r}_n \quad (11.7)$$

Zodat $\alpha = 2\pi \underline{g} \cdot \underline{R} = -2\pi \underline{\Delta g} \cdot \underline{r}$ (11.8)

We kiezen een coördinatenstelsel, zodanig dat:

$$\alpha = -2\pi \underline{\Delta g} \cdot \underline{r}_s = -2\pi (\underline{\Delta g}_g \cdot x_g + \underline{\Delta g}_t \cdot x_t) \quad (11.9)$$

Hierin is \underline{r}_s gelegen in het grensvlak tussen de kristallen 1 en 2 met als componenten x_g en x_t respectievelijk parallel aan en loodrecht op de in dit vlak gelegen \underline{g} -vector. We beschouwen alleen parallel-moirépatronen; dit wil zeggen, dat in (11.9) $\underline{\Delta g}_g = \underline{\Delta g}$; $\underline{\Delta g}_t = 0$; $x_g = x$ en $x_t = 0$. Wij definiëren nu

$$M = \frac{1}{|\underline{\Delta g}|} = \left| \left(\frac{1}{d_2} - \frac{1}{d_1} \right)^{-1} \right| = \frac{d_1 d_2}{|d_1 - d_2|} \quad (11.10)$$

Voor de amplitude ϕ_g van de gediffracteerde bundel volgt uit combinatie van (11.5), (11.9) en (11.10)

$$\phi_g = \frac{i\pi}{\xi_g s} \left\{ \int_0^{z_1} e^{-2\pi i s z} dz + \int_{z_1}^{z_1+z_2} e^{-2\pi i (x/M) - 2\pi i s z} dz \right\} \quad (11.11)$$

$$\phi_g = \frac{i}{\xi_g s} \left[e^{-i\pi s z_1} \sin \pi s z_1 + e^{2\pi i (x/M)} e^{-i\pi s (2z_1+z_2)} \sin \pi s z_2 \right] \quad (11.12)$$

Als het grensvlak evenwijdig is aan het oppervlak van het folie en de dikten z_1 en z_2 constant zijn, wordt de vorm van de moiré-fringes slechts door α bepaald.

Uit (11.12) volgt voor de intensiteit van de gediffracteerde bundel:

$$I_g = \phi_g \cdot \phi_g^* = \frac{1}{(\xi_g s)^2} \left[\sin^2 \pi z_1 s + \sin^2 \pi z_2 s + 2 \sin \pi z_1 s \sin \pi z_2 s \times \right. \\ \left. \cdot \cos 2\pi (x/M + s(z_1+z_2)) \right] \quad (11.13)$$

$$\text{Verder is: } I_0 = 1 - I_g \quad (11.14)$$

(11.14) betekent eigenlijk alleen maar dat helderveld- en donkerveldbeeld complementair zijn; de kinematische theorie kan met anomale absorptie geen rekening houden (zie voor deze begrippen 11-3-c).

Uit (11.13) volgt het contrast C_T :

$$C_T = I_0(z_1 + z_2)^{(\max)} - I_0(z_1 + z_2)^{(\min)} = \\ \frac{4}{(\xi_g s)^2} \sin \pi s z_1 \sin \pi s z_2 \quad (11.15)$$

Bij deze afleiding is, zoals dit ook verder in dit verslag zal gebeuren, aangenomen dat de deviatieparameter s en de extinctieafstand ξ_g voor beide delen van het bikristal dezelfde zijn. Aan het grensvlak van de kristaldelen treedt dan alleen een fasesprong $e^{-i\alpha}$ op, reden waarom dit soort grensvlakken α -grenzen worden genoemd. In het algemeen geven α -grensvlakken aanleiding tot α -fringes in het electronenmicroscop-beeld. Als voor beide kristaldelen geldt, dat $(s\xi_g)_1 \neq (s\xi_g)_2$ wordt het grensvlak tussen beide kristaldelen een δ -grens genoemd, die aanleiding kan geven tot het zichtbaar zijn van zg. δ -fringes in het electronenmicroscopbeeld [2]. Voor een goed epitactisch bikristal van koper op nikkel kan worden aangenomen, dat de fringes een puur α -karakter hebben.

11-3 Toepassen van de Dynamische Diffractietheorie

11-3a Inleiding

Wij zullen ons hier slechts bezig houden met het tweestraalsgeval; deze beperking houdt in, dat wij een systeem beschouwen, waarin naast de doorgaande bundel met amplitude ϕ_0 slechts één gediffracteerde bundel met amplitude ϕ_g optreedt. In de praktijk, d.w.z. gezeten achter de electronenmicroscop, blijkt het tweestraalsgeval vaak goed benaderd te kunnen worden. Een beschrijving van zuivere moiré-patronen voor de meerstraalssituatie is gegeven in [3].

In de dynamische diffractietheorie zijn verschillende beschrijvingswijzen mogelijk. Deze zijn vermeld in Appendix A. De door ons toegepaste methodiek, een variant op de Darwinrepresentatie, is analoog met, maar niet identiek aan de door Gevers [4] toegepaste. Hashimoto et al. [5, 6, 7] pasten de Blochgolfrepresentatie toe. Voor de berekeningen gaan wij uit van de differentiaalvergelijkingen van Howie en Whelan [8].

De Howie-Whelanvergelijkingen vormen een stelsel gekoppelde differentiaalvergelijkingen, die de interactie tussen doorgaande en gediffracteerde bundel(s) op iedere diepte in het kristal beschrijven.

Bij veronachtzaming van anomale absorptie luiden de Howie-Whelan-vergelijkingen voor het tweestraalsgeval:

$$\frac{d\phi_o}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_o + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i g \cdot \underline{R}) \quad (11.16)$$

$$\frac{d\phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_o \exp(-2\pi i s z - 2\pi i g \cdot \underline{R})$$

Voor een imperfect kristal met $\underline{R} = \underline{R}(z)$, zoals bijvoorbeeld het geval is bij een diffusiezône, zijn deze gekoppelde differentiaalvergelijkingen niet eenvoudig op te lossen.

Voor een perfect kristal evenwel is $\underline{R} = 0$, waardoor de vergelijkingen (11.16) al onmiddellijk worden vereenvoudigd tot het stelsel:

$$\frac{d\phi_o}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_o + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_g \exp(2\pi i s z) \quad (11.17)$$

$$\frac{d\phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_o \exp(-2\pi i s z)$$

Na oplossing van dit stelsel (11.17) (zie Appendix B), onder toepassing van de randvoorwaarden, wordt voor de intensiteit van de doorgaande bundel (I_o) en voor de intensiteit van de gediffracteerde bundel (I_g) voor een perfect kristal verkregen:

$$I_o = \frac{2w^2 + 1}{2(w^2 + 1)} + \frac{1}{2(w^2 + 1)} \cos 2\pi \sigma z_1 \quad (11.18)$$

$$I_g = \frac{1}{2(w^2 + 1)} - \frac{1}{2(w^2 + 1)} \cos 2\pi \sigma z_1 \quad (11.19)$$

waarbij:

$$w = s \xi_g$$

en
$$\sigma = \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_g^2}} = \frac{1}{\xi_g} \sqrt{w^2 + 1}$$

We zien, dat voor alle waarden van z :

$$I_o + I_g = 1 \quad (11.20)$$

wat voor de hand ligt, omdat anomale absorptie bij onze berekeningen verwaarloosd is. Uit (11.18) en (11.19) volgen voor de maxima en minima van de doorgaande en gediffracteerde bundel

$$\begin{aligned} I_o^{(\max)} &= 1 \\ I_o^{(\min)} &= \frac{2w^2}{2(w^2 + 1)} \\ I_g^{(\max)} &= \frac{1}{w^2 + 1} \end{aligned} \quad (11.21)$$

en $I_g^{(\min)} = 0$

We zien, dat voor grote afwijkingen van de Braggstand, waarvoor geldt dat $|s| \gg 0$ en $|w| = \xi_g |s| \gg 1$ de intensiteit van de doorgaande bundel praktisch niet verandert, terwijl de intensiteit van de gediffracteerde bundel heel klein blijft. Dit is in overeenstemming met de opvatting, dat de kinematische diffractietheorie, die gebaseerd is op de aanname dat de intensiteit van de gediffracteerde bundel steeds zeer klein is t.o.v. de intensiteit van de doorgaande bundel, een limietgeval is van de dynamische theorie. Onder omstandigheden, waarbij moet worden gebruik gemaakt van de dynamische theorie, blijkt dat de intensiteit van de gediffracteerde bundel die van de doorgaande bundel vele malen kan overtreffen. Voor een bepaalde kolom in een kristal hebben w en z_1 bepaalde waarden, maar voor verschillende kolommen in hetzelfde kristal kunnen deze waarden, en daarmee de uit (11.18) en (11.19) volgende intensiteiten variëren, aanleiding gevend tot de zg. diktecontouren (in een wigvormig kristal) en buigingscontouren (in een gebogen kristal).

11-3b Dynamische Theorie van Moiré-Patronen

Voor de berekeningen moet nu gebruik worden gemaakt van de Howie-Whelanvergelijkingen (11.16) voor een imperfect kristal.

We zagen immers dat kristal 2 een verstoring is op kristal 1. In hoofdstuk 11.2 zagen we reeds dat (vgl. 11.9):

$$2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R} = -2\pi i \Delta \underline{g} \cdot \underline{r} = +i\alpha$$

zodat we voor de Howie-Whelanvergelijkingen in kristal 2 kunnen schrijven:

$$\frac{d\phi_o}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_o + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_g \exp(i\alpha) \exp(2\pi i s z) \quad (11.22)$$

$$\frac{d\phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_o} \phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_o \exp(-i\alpha) \exp(-2\pi i s z)$$

Het oplossen van het stelsel vergelijkingen (11.22) verloopt analoog aan het oplossen van het stelsel (11.17) voor een perfect kristal (Appendix B). In de door ons gebruikte variant op de Darwin-representatie (zie Appendix A) hebben de basisoplossingen van de golf functies voor doorgaande bundel (ϕ_o) en gediffracteerde bundel (ϕ_g) voor het imperfecte kristal dezelfde gedaante als voor het perfecte kristal. De "voorgeschiedenis" van de bundels, waaronder de fasesprong $e^{i\alpha}$ aan het grensvlak van de beide kristaldelen, wordt dan in de coëfficiënten, die bij de basisoplossingen behoren, vervat.

Zelfs als, zoals tot dusver gebeurde, anomale absorptie verwaarloosd wordt, is de berekening van de intensiteit van doorgaande bundel ($I_o(z_1+z_2)$) en de daar onmiddellijke uit volgende intensiteit van gediffracteerde bundel $I_g(z_1+z_2)$ een moeizame zaak, alhoewel de berekening verder geen slimme trucs of dubieuze aannamen vereist. De berekeningen zijn uitgevoerd in Appendix C.

Voor de intensiteit van de doorgaande bundel aan de onderkant van het bikristal wordt uiteindelijk verkregen:

$$I_o(z_1+z_2) = I_o(z_1) I_o(z_2) + I_g(z_1) I_g(z_2) + 2 \left\{ I_o(z_1) I_g(z_1) I_o(z_2) I_g(z_2) \right\}^{\frac{1}{2}} \times \cos \left(2\pi \frac{x-x_o}{M} \right) \quad (11.13)$$

x_0 wordt gegeven door:

$$\operatorname{tg} 2\pi \frac{x_0}{M} = i \frac{[\psi_0^*(z_1) \psi_g(z_1) \psi_0^*(z_2) \psi_g(z_2) - \psi_0(z_1) \psi_g^*(z_1) \psi_0(z_2) \psi_g^*(z_2)]}{[\psi_0^*(z_1) \psi_g(z_1) \psi_0^*(z_2) \psi_g(z_2) + \psi_0(z_1) \psi_g^*(z_1) \psi_0(z_2) \psi_g^*(z_2)]} \quad (11.24)$$

$I_0(z_1)$, $I_g(z_1)$, $I_0(z_2)$, $I_g(z_2)$, $\psi_0(z_1)$, $\psi_g(z_1)$, $\psi_0(z_2)$ en $\psi_g(z_2)$ zijn verkorte schrijfwijzen voor de intensiteiten en amplituden, zoals die optreden bij diffractie aan perfecte kristallen met dikten z_1 en z_2 .

Uit (11.23) blijkt dat het contrast C_T wordt gegeven door:

$$C_T = I_0(z_1+z_2)^{(\max)} - I_0(z_1+z_2)^{(\min)} = 4 \left\{ I_0(z_1) I_0(z_2) I_g(z_1) I_g(z_2) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (11.25)$$

C_T is hier het contrast van het helderveldbeeld.

Met (11.18) en (11.19) volgt uit (11.25):

$$C_T = \frac{4}{(w^2+1)^2} \left[\sin^4 \pi \sigma z_1 \sin^4 \pi \sigma z_2 + (w^2+1)^2 \sin^2 \pi \sigma z_1 \sin^2 \pi \sigma z_2 + \right. \\ \left. - (w^2+1) \sin^4 \pi \sigma z_1 \sin^2 \pi \sigma z_2 - (w^2+1) \sin^2 \pi \sigma z_1 \sin^4 \pi \sigma z_2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (11.26)$$

Men ziet dus, dat het contrast op nogal ingewikkelde wijze afhangt van de kristaldikten z_1 en z_2 en de deviatieparameter s . Uit (11.26) volgt, dat als $\xi_g s = w \gg 1$, hetgeen ook wil zeggen $\sigma = \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_g^2}} \approx s$ vergelijking (11.26) benaderd kan worden met

$$C_T = \frac{4}{w} \sin \pi \sigma z_1 \sin \pi \sigma z_2 \quad (11.27)$$

welke uitdrukking identiek is met het in (11.15) gegeven kinematisch contrast. Ook hier zien we dus, dat het op kinematische wijze afgeleide contrast niets anders is dan het limietgeval voor $\xi_g |s| \gg 1$ van het op dynamische wijze afgeleide contrast.

In fig. 2 is het met behulp van de dynamische theorie berekende contrast (11.26) weergegeven als functie van de grootheid w .

De dikten z_1 en z_2 zijn hierbij resp. gelijk aan 1000 \AA en 400 \AA genomen, terwijl $\xi_g = 278 \text{ \AA}$ ($\approx \xi_{200}$ voor koper en nikkel [1]). (Met deze waarden anticiperen wij op het denkbeeldige epitactisch Cu/Ni bikristal, waaraan in hoofdstuk III numerieke berekeningen worden gedaan).

In fig. 2, die symmetrisch is rond $w = 0$, valt op dat het contrast met oscillaties, die bepaald worden door de sinustermen in (II.26) naar grotere waarden van $|w|$ afneemt; de afname in het contrast wordt beheerst door de factor $\frac{1}{(w^2+1)^2}$ in (II.26). Voorts is het duidelijk, dat voor grote waarden van $|w|$, dus voor diffractieomstandigheden, waaronder de kinematische theorie kan worden toegepast, van het contrast weinig overblijft. Bedenk overigens, dat de feitelijke vorm van fig. 2 afhangt van de keuze van z_1 , z_2 , en ξ_g , alhoewel het hierboven geschetste totaalbeeld bij een andere keuze staande blijft.

II-3c Invloed van de Anomale Absorptie

Ten gevolge van inelastische verstrooiing, een verzamelnaam overigens, die verschillende verstrooiingsmechanismen dekt, zullen de Blochgolven $b^{(1)}(\underline{k}_1, \underline{r})$ en $b^{(2)}(\underline{k}_2, \underline{r})$ gedeeltelijk tot buiten de opening van het objectiefdiafragma worden verstrooid.

Het blijkt, dat de ene blochgolf sterker inelastisch verstrooid wordt dan de andere; het effect is gering in zeer dunne kristallen, maar neemt snel in belangrijkheid toe, naarmate het kristal dikker wordt.

Door de inelastische verstrooiing wordt een gedeelte van de amplitude van de Blochgolven niet meegenomen bij de beeldvorming. Voor een onbevooroordeeld waarnemer, als het fluorescerend scherm, lijkt het, alsof een absorptie van electronen heeft plaatsgevonden. Wij, daarentegen, weten wel beter en spreken dan ook liever van anomale absorptie.

Met de anomale absorptie kan rekening worden gehouden door in de Howie-Whelanvergelijkingen de reële grootheden $\frac{1}{\xi_0}$ en $\frac{1}{\xi_g}$ te vervangen door resp. de complexe grootheden $\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'}$ en $\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'}$ [8, 9, 10].

In Appendix D wordt uiteengezet hoe in dit geval de oplossingen van de Howie-Whelanvergelijkingen voor het perfecte kristal veranderen ten opzichte van het geval, waarbij met de anomale absorptie geen rekening wordt gehouden.

Het anomale absorptie-effect zelf wordt, in samenhang met de symmetrie-eigenschappen van het kristal, behandeld in [10, 11]. Als resultaat wordt voor de intensiteit van de doorgaande bundel (I_0) en gediffracteerde bundel (I_g) verkregen:

$$I_0 = \frac{e^{-4\pi az_1}}{4(w^2+1)} \left\{ (2w^2+1) (e^{4\pi bz_1} + e^{-4\pi bz_1}) + 2w\sqrt{(w^2+1)} (e^{4\pi bz_1} - e^{-4\pi bz_1}) + 2 \cos 2\pi\sigma z_1 \right\} \quad (11.28)$$

$$I_g = \frac{e^{-4\pi az_1}}{4(w^2+1)} \left\{ e^{4\pi bz_1} + e^{-4\pi bz_1} - 2 \cos 2\pi\sigma z_1 \right\} \quad (11.29)$$

waarin $a = \frac{1}{2\xi'_0}$ en $b = \frac{1}{2\xi'_g \sqrt{(w^2+1)}}$

De factor $e^{-4\pi az_1}$ speelt in de uitdrukkingen voor I_0 en I_g dezelfde rol en beschrijft daarmee een gemiddelde- of achtergrondabsorptie. De eigenlijke anomale absorptie wordt beschreven met de termen $e^{4\pi bz_1}$ en $e^{-4\pi bz_1}$ in (11.28) en (11.29).

Eenvoudig is in te zien, dat bij verwaarlozing van anomale absorptie ($a = 0$ en $b = 0$) de vergelijkingen (11.28) en (11.29) overgaan in resp. (11.18) en (11.19), die reeds voor het perfecte kristal zonder anomale absorptie werden afgeleid.

Een exacte berekening van het contrast van zuivere moiré-patronen, *de diepte* waarbij met anomale absorptie rekening wordt gehouden, is wel te geven, maar het is eenvoudiger om de Howie-Whelan-vergelijkingen voor dit geval numeriek op te lossen (zie hoofdstuk III).

Literatuur

- [1] Hirsch, P.B., Howie, A., Whelan, M.J., Nicholson, R.B. & Pashley, D.W.,
Electron Microscopy of Thin Crystals, Londen (Butterworths) 1965,
pp. 156 vv, 496
- [2] Gevers, R., Van Landuyt, J. & Amelinckx, S.
Phys. Stat. Sol. 11, 689 (1965)
- [3] Gevers, R.
Phys. Stat. Sol. 3, 2289 (1963)
- [4] Gevers, R.
Phil. Mag. 7 (11), 1681 (1962)
- [5] Hashimoto, H., Mannami, M. & Naiki, T.
Phil. Trans. Roy. Soc. A 253, 459 (1961)
- [6] Hashimoto, H., Mannami, M. & Naiki, T.
Phil. Trans. Roy. Soc., A 253, 490 (1961)
- [7] Hashimoto, H. & Mannami, M.
J. Phys. Soc. Japan 17, 520 (1962)
- [8] Howie, A. & Whelan, M.J.
Proc. Roy. Soc. A 263, 217 (1961)
- [9] Yoshioka, J.
J. Phys. Soc. Japan 12, 618 (1957)
- [10] Molière, K.
Ann. Phys. (Leipzig) 34, 461 (1939)
- [11] Gevers, R., Blank, H. & Amelinckx, S.
Phys. Stat. Sol. 13, 449 (1966)
- [12] Van Dijk, T.
Scriptie, juli 1975 (intern rapport)

FIGUREN BIJ HOOFDSTUK II

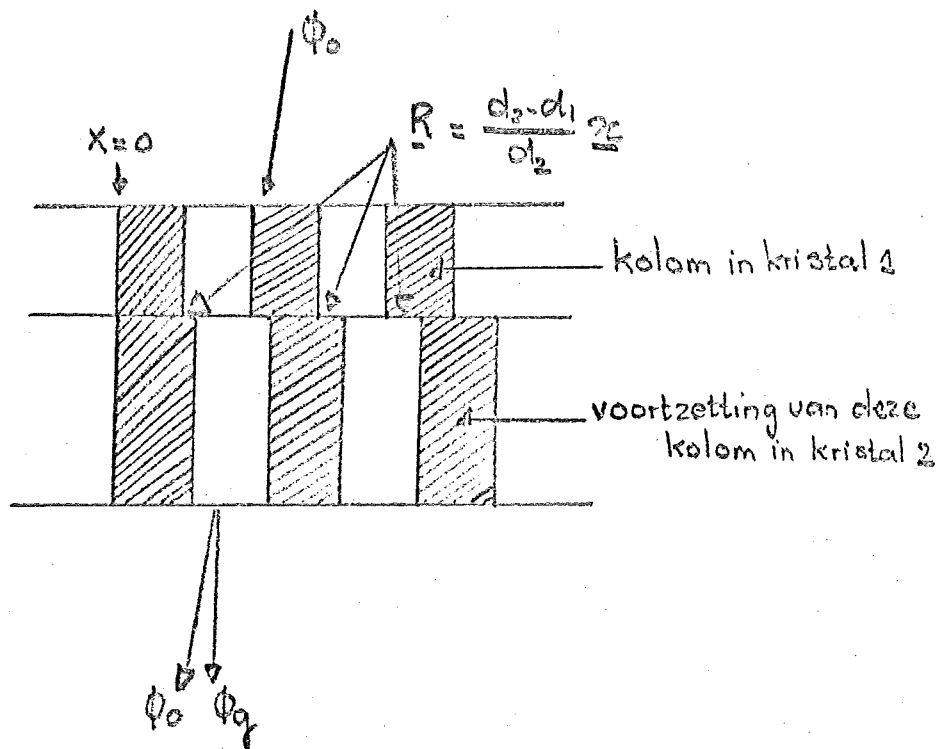


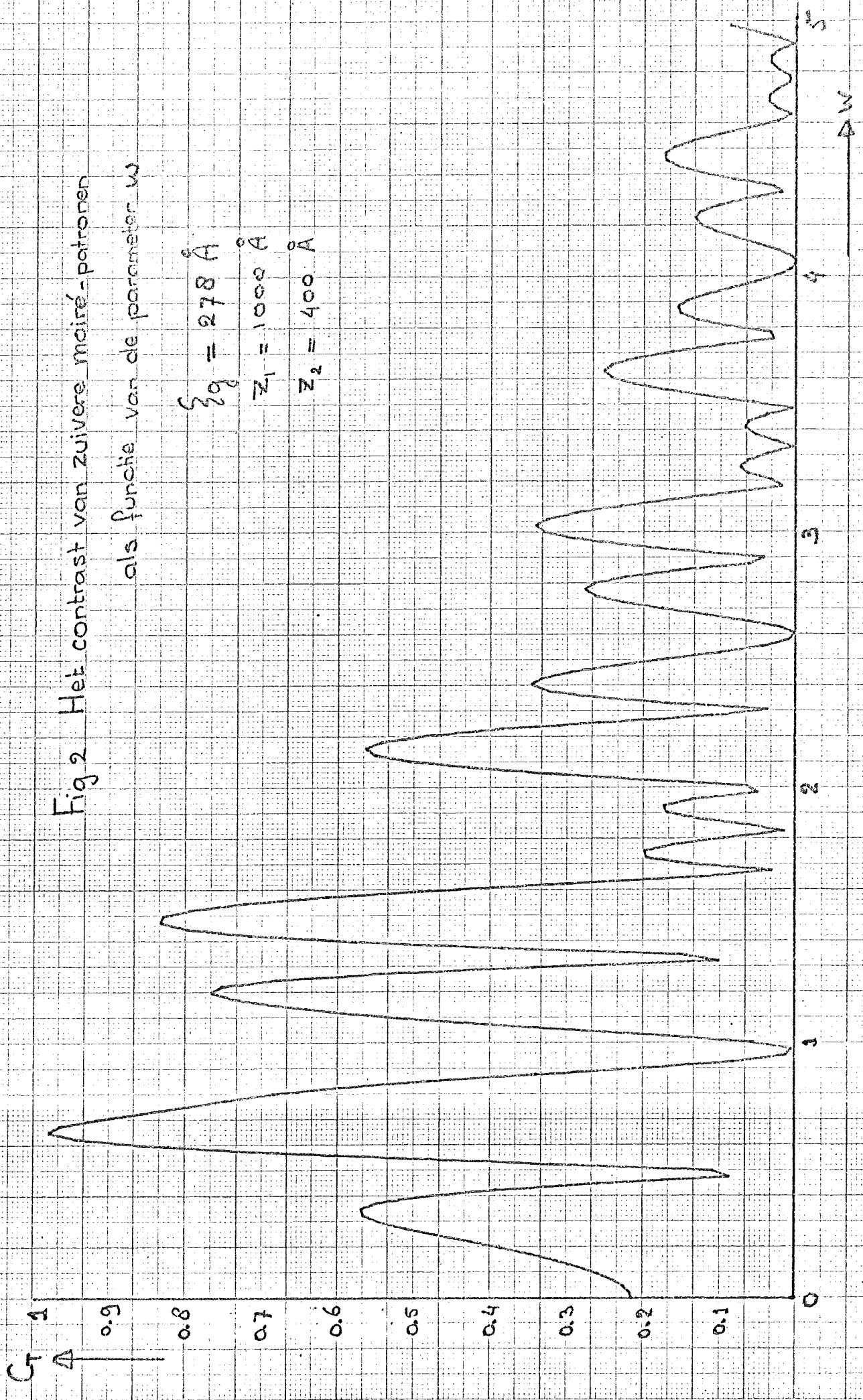
Fig. 1 Kolombenadering in een Epitactisch Bikristal

Fig 2 Het contrast van zuivere mairé-patronen
als functie van de parameter w

$$\xi g = 278 \text{ \AA}$$

$$z_1 = 1000 \text{ \AA}$$

$$z_2 = 400 \text{ \AA}$$



III. MOIRE-PATRONEN NA DIFFUSIE

III-1. Beschrijving van het Model

In een epitactisch bikristal, gevormd door een component A met dikte z_1 en een component B met dikte z_2 , is tengevolge van een warmtebehandeling een diffusiezône ontstaan. In de z -richting is dan een concentratieprofiel aanwezig. We zullen aannemen, dat A en B in alle verhoudingen mengbaar zijn en dat de wet van Vegard, die stelt dat de roosterconstante van de binaire legering rechtevenredig is met de samenstelling ervan, over het hele concentratiegebied opgaat. In dat geval is het concentratieprofiel isomorf met het roosterconstante-profiel.

Om de intensiteiten van de op de diepte $z = z_1 + z_2$ uittredende doorgaande en gediffracteerde bundel (tweestraalsgeval) te berekenen moet het verplaatsingsveld $\underline{R}(z)$ van het systeem vastgelegd worden. Hiertoe wordt het bij $z = 0$ aanwezige rooster als referentietralie opgevat.

Er geldt:

$$\text{op } z = 0 \quad 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(0) = 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{0} = 0$$

$$\text{op } z \neq 0 \quad 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(z) = -2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r}$$

waarbij de vector \underline{r} evenwijdig is met \underline{g} en $\underline{\Delta g}$.

Als het roosterconstanteprofiel $d(z)$ vastligt, geldt:

$$-2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r} = -2\pi i \left[\frac{1}{d(z)} - \frac{1}{d(z=0)} \right] x \quad (\text{III.1})$$

We zien, dat voor $x = 0$ geldt, dat $-2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r} = 0$ voor alle z ; dit betekent dat de oorsprong van het coördinaten stelsel zodanig is gekozen, dat de invallende bundel het kristal op $x = 0$ "ziet" als een perfect kristal. In fig. 1. is geschetst hoe de situatie er rond $x = 0$ uitziet voor het geval in de diffusiezône een lineair concentratieprofiel (of roosterconstanteprofiel) aanwezig is.

*op. p. 18. fig. 1.
kristal*

Als we deze situatie bezien (fig. 1) valt op, dat, als gevolg van de concentratiegradiënt de diffusiezône beschreven kan worden als een scheef rooster, waarvan de vlakken bij toenemende $|x|$ steeds grotere hoeken maken met de vlakken van de oorspronkelijke epitactische componenten A en B, zodat bij grotere waarden van $|x|$ al spoedig niet meer aan de Laue-condities voor diffractie wordt voldaan. Om iets meer te kunnen zeggen over de veranderingen, die moiré-patronen ten gevolge van interdiffusie ondergaan, zullen we voor een dergelijk model, hoe onvolkomen dit ook moge zijn, de intensiteiten van doorgaande en gediffracteerde bundel berekenen.

Het zal blijken, dat de uitkomsten van de berekeningen enige interessante aspecten aan het licht brengen, die aanwijzingen geven tot een verbetering van het model, zodanig, dat de berekeningen in overeenstemming zijn met het door ons experimenteel vastgestelde verband tussen de spatie van moiré-patronen en de grootte van de diffusiezône.

III-2. Toepassen van de Kinematische Theorie

De amplitude van de bundel, gediffracteerd door een imperfect kristal met dikte $z_1 + z_2$, wordt gegeven door (II.5):

$$\phi_g = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^{z_1+z_2} e^{-2\pi i g \cdot R(z)} e^{-2\pi i s z} dz = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^{z_1+z_2} e^{2\pi i |\Delta g(z)|} \cdot x e^{-2\pi i s z} dz \quad (III.2)$$

Deze integraal wordt nu berekend voor een eenvoudig geval, waarvoor geldt:

$$0 \leq z \leq z_1 - \frac{p}{2} : \Delta g(z) = 0$$

$$z_1 - \frac{p}{2} \leq z \leq z_1 + \frac{p}{2} : |\Delta g(z)| = \left| \frac{1}{d(z)} - \frac{1}{d_1} \right|$$

met $d(z) = d_1 + \left(\frac{d_2 - d_1}{p} \right) \left(z - z_1 + \frac{p}{2} \right)$ (III.3)

$$z_1 + \frac{p}{2} \leq z \ll z_1 + z_2 : |\Delta g(z)| = \left| \frac{1}{d_2} - \frac{1}{d_1} \right| = \frac{1}{M}$$

Deze betrekkingen definiëren een systeem, bestaande uit een epitactisch koppel van kristallen A en B met resp. dikten z_1 en z_2 , waarin ten gevolge van diffusie, symmetrisch rond $z = z_1$ een diffusiezone aanwezig is van dikte p met lineair roosterconstanteprofiel. De spaties van de diffracterende vlakken van A en B zijn resp. d_1 en d_2 .

Voor $z_1 - \frac{p}{2} \leq z \leq z_1 + \frac{p}{2}$ volgt uit (III.3):

$$|\underline{\Delta g}(z)| = \frac{|d_1 - d(z)|}{d_1 \cdot d(z)} = \frac{|(d_1 - d_2)(z - z_1 + \frac{p}{2})|}{pd_1 d(z)}$$

Met $d_1 d(z) \approx d_1 d_2$ en $\frac{|(d_1 - d_2)|}{d_1 d_2} = \frac{1}{M}$ volgt:

$$|\underline{\Delta g}(z)| = \frac{z - z_1 + \frac{p}{2}}{pM} \quad (z_1 - \frac{p}{2} \leq z \leq z_1 + \frac{p}{2}) \quad (III.4)$$

Nu volgt uit (III.2) in combinatie met (III.3) en (III.4)

$$\begin{aligned} \phi_g = & \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^{z_1 - \frac{p}{2}} e^{-2\pi i s z} dz + \frac{i\pi}{\xi_g} \int_{z_1 - \frac{p}{2}}^{z_1 + \frac{p}{2}} e^{2\pi i (\frac{z - z_1 + \frac{p}{2}}{pM}) x} e^{-2\pi i s z} dz + \\ & + \frac{i\pi}{\xi_g} \int_{z_1 + \frac{p}{2}}^{z_1 + z_2} e^{2\pi i \frac{x}{M}} e^{-2\pi i s z} dz \end{aligned} \quad (III.5)$$

of $\phi_g = A + B + C. \quad (III.6)$

Nu is:

$$A = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_0^{z_1 - \frac{p}{2}} e^{-2\pi i s z} dz = \frac{i}{\xi_g s} e^{-\pi i s (z_1 - \frac{p}{2})} \sin \pi s (z_1 - \frac{p}{2}) \quad (III.7)$$

$$C = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_{z_1 + \frac{p}{2}}^{z_1 + z_2} e^{-2\pi i \frac{x}{M}} e^{-2\pi i s z} dz = \frac{-e^{2\pi i \frac{x}{M}}}{2\xi_g s} \left\{ e^{-2\pi i s (z_1 + z_2)} - e^{-2\pi i s (z_1 + \frac{p}{2})} \right\}$$

$$C = \frac{i}{\xi_g s} e^{2\pi i \frac{x}{M}} e^{-2\pi i s z_1} e^{-\pi i s (z_2 + \frac{p}{2})} \sin \pi s (z_2 - \frac{p}{2}) \quad (III.8)$$

$$B = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_{z_1 - \frac{p}{2}}^{z_1 + \frac{p}{2}} e^{2\pi i \left(\frac{z - z_1 + \frac{p}{2}}{pM}\right) x} e^{-2\pi i s z} dz$$

$$B = \frac{i\pi}{\xi_g} e^{2\pi i \left(\frac{-z_1 + \frac{p}{2}}{pM}\right) x} \int_{z_1 - \frac{p}{2}}^{z_1 + \frac{p}{2}} e^{2\pi i \frac{x}{pM} z} e^{-2\pi i s z} dz$$

$$B = \frac{1}{2\xi_g} \frac{e^{2\pi i \left(\frac{-z_1 + \frac{p}{2}}{pM}\right) x}}{\left(\frac{x}{pM} - s\right)} \left\{ e^{2\pi i \left(\frac{x}{pM} - s\right) \left(z_1 + \frac{p}{2}\right)} - e^{2\pi i \left(\frac{x}{pM} - s\right) \left(z_1 - \frac{p}{2}\right)} \right\}$$

$$B = \frac{ip}{\xi_g} e^{\pi i \frac{x}{M}} e^{-2\pi i s z_1} \frac{\sin \pi \left(\frac{x}{M} - sp\right)}{\left(\frac{x}{M} - sp\right)} \quad (III.9)$$

Met (III.7), (III.8) en (III.9) in (III.6) volgt nu voor de amplitude van de gediffracteerde bundel:

$$\begin{aligned} \phi_g = & \frac{i}{\xi_g s} \sin \pi s \left(z_1 - \frac{p}{2}\right) e^{-\pi i s \left(z_1 - \frac{p}{2}\right)} + \frac{ip}{\xi_g} \frac{\sin \pi \left(\frac{x}{M} - sp\right)}{\left(\frac{x}{M} - sp\right)} e^{\pi i \left(\frac{x}{M} - 2sz_1\right)} + \\ & + \frac{i}{\xi_g s} \sin \pi s \left(z_2 - \frac{p}{2}\right) e^{\pi i \left(\frac{2x}{M} - 2sz_1 - sz_2 - \frac{sp}{2}\right)} \end{aligned} \quad (III.10)$$

Nadere beschouwing van (III.10) leert, dat voor zeer kleine diffusie-zônes ($p \approx 0$) de tweede term van het rechterlid verdwijnt en de betrekking voor het zuivere moiré-patroon (II.12) overblijft.

voor
at form
p. 7 + III-10
at recordal

De verstoring van het profiel van de zuivere moiré-patronen wordt dus teweeggebracht door de tweede term van het rechterlid van (III.10). Voor deze term kan geschreven worden

$$\frac{i p}{\xi_g} \frac{\sin \pi \left(\frac{x}{M} - s p \right)}{\left(\frac{x}{M} - s p \right)} e^{\pi i \left(\frac{x}{M} - 2 s z_1 \right)} = \frac{i}{\xi_g} \frac{\sin \pi \left(s - \frac{x}{M p} \right) p}{\left(s - \frac{x}{M p} \right)} e^{\pi i \left(\frac{x}{M} - 2 s z_1 \right)} \quad (\text{III.11})$$

Het is duidelijk, dat de invloed van deze term, die de bijdrage van de diffusiezône tot de amplitude van de gediffracteerde bundel, beschrijft, voor zeer grote waarden van x verwaarloosd kan worden. De interactie is dus klein voor $|x| \gg |M p s|$, terwijl daarentegen de interactie maximaal zou moeten zijn voor $x = M p s$. Dit laatste is op zich wel juist, maar het betekent tevens, dat de kinematische theorie faalt in het beschrijven van de diffractie aan het gegeven model, vastgelegd door de betrekkingen (III.3), zoals hieronder zal worden toegelicht.

In de diffusiezône kan een effectieve deviatieparameter s' worden gedefinieerd als (zie ook (II.7)):

$$s' = s + g \frac{dR}{dz} = s - \frac{\partial g}{\partial z} x \quad (\text{III.12})$$

Met (III.4) volgt uit (III.12):

$$s' = s - \frac{x}{M p} \quad (\text{III.13})$$

Nu is
$$\frac{i \pi \sin \pi s' p}{\xi_g \pi s'}$$

de kinematische amplitude voor een perfect kristal met dikte p . Als

nu $x = M p s$, dan is $s' = 0$ en mag de kinematische theorie niet toegepast worden. Voor $|x| \gg |M p s|$ mag de kinematische theorie wel toegepast worden en voorspelt de theorie, dat de periodiciteit van het moiré-patroon gelijk is aan die van een zuiver moiré-patroon.

Het resultaat voor grote $|x|$ hangt samen met het gekozen model en kan ook uit de geometrische eigenschappen van het model verklaard worden (zie III-1). Immers voor grote $|x|$ draagt de diffusiezône niet tot de diffractie bij.

III-3. Toepassen van de Dynamische Theorie

III-3a. Numerieke oplossing van de Howie-Whelanvergelijkingen, voor het tweestraalsgeval

In deze paragraaf zal aangegeven worden, hoe de intensiteiten van doorgaande en gediffracteerde bundel aan de onderkant van een kristal, waarin diffusie heeft plaatsgevonden, kunnen worden berekend. Het model dat hiervoor gebruikt wordt, is beschreven in III-1.

Voor een imperfect kristal zijn de Howie-Whelanvergelijkingen, rekening houdende met anomale absorptie (zie Appendix D), voor het tweestraalsgeval:

$$\frac{d\phi_o}{dz} = \pi i \left(\frac{1}{\xi_o} + \frac{i}{\xi_o'} \right) \phi_o + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right) \phi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(z)) \quad (III.14)$$

$$\frac{d\phi_g}{dz} = \pi i \left(\frac{1}{\xi_o} + \frac{i}{\xi_o'} \right) \phi_g + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right) \phi_o \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(z))$$

Met (II.7): $2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(z) = -2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r}$.

Nu is: $\underline{\Delta g}(z) = \underline{g}(z) - \underline{g}(z=0)$

$$\text{en: } |\underline{\Delta g}(z)| = \left| \frac{1}{d(z)} - \frac{1}{d(z=0)} \right| \quad (III.15)$$

$$\text{Zodat: } 2\pi i \underline{g} \cdot \underline{R}(z) = -2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r} = i \alpha(z) \quad (III.16)$$

waarin: $\alpha(z) = -2\pi i \underline{\Delta g}(z) \cdot \underline{r}$

De berekening van I_o en I_g voor zuivere moiré patronen onder verwaarlozing van anomale absorptie (zie II-3b en Appendix C) is al behoorlijk omslachtig. Voor een algemene situatie, die met concentratieprofiel en anomale absorptie, kan dan ook het eenvoudigst een numerieke methode gebruikt worden.

met p. 17
wiskunde
gebruikt

Het kristal wordt daartoe opgebouwd gedacht uit een groot aantal segmenten, genummerd 1 t/m N (fig. 2); in ieder segment wordt de functie $\alpha(z)$ constant verondersteld.

Voor het n^e segment, waarvoor $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ is de oplossing van het stelsel (III.14):

$$\psi_o(z_1(z_{n-1} < z < z_n)) = c_o^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(1)} z} + c_o^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(2)} z} \quad (III.17)$$

en

$$\psi_g(z_1(z_{n-1} < z < z_n)) = c_g^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z} + c_g^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(2)} z} \quad (III.18)$$

Hierin zijn $\gamma_o^{(1)}$, $\gamma_o^{(2)}$, $\gamma_g^{(1)}$ en $\gamma_g^{(2)}$ complex (anomale absorptie, Appendix D).

De coëfficiënten $c_o^{(1)}(n)$, $c_o^{(2)}(n)$, $c_g^{(1)}(n)$ en $c_g^{(2)}(n)$ volgen uit de randvoorwaarden op $z = z_{n-1}$

$$c_o^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(1)} z_{n-1}} + c_o^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(2)} z_{n-1}} = \psi_o(z_{n-1}) \quad (III.19)$$

$$c_g^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z_{n-1}} + c_g^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(2)} z_{n-1}} = \psi_g(z_{n-1}) \quad (III.20)$$

Substitutie van $\phi_o^{(1)}(z) = c_o^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(1)} z}$ en

$$\phi_g^{(1)}(z) = c_g^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z}$$

in de eerste vergelijking van het stelsel (III.14) levert:

$$2\pi i \gamma_o^{(1)} c_o^{(1)}(n) = \pi i \left(\frac{1}{\xi_o} + \frac{i}{\xi_o'} \right) c_o^{(1)} + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right) e^{i\alpha(n)} c_g^{(1)}(n)$$

$$c_g^{(1)}(n) = q_g \left(2\gamma_o^{(1)} - \frac{1}{q_o} \right) e^{-i\alpha(n)} c_o^{(1)}(n) \quad (III.21)$$

met $q_g = \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}\right)$ en $q_o = \left(\frac{1}{\xi_o} + \frac{i}{\xi'_o}\right)$

Analoog is

$$c_g^{(2)}(n) = q_g \left(2\gamma_o^{(2)} - \frac{1}{q_o}\right) e^{-i\alpha(n)} c_o^{(2)}(n) \quad (III.22)$$

Nu zijn, voor gegeven diffractieomstandigheden $\gamma_o^{(1)}$ en $\gamma_o^{(2)}$ constant; voorts nemen we aan, dat de absorptie- en extinctieafstand geen functies zijn van de concentratie en dus voor alle z dezelfde waarde hebben. In dat geval schrijven we voor (III.21) en (III.22) respectievelijk

$$c_g^{(1)}(n) = p_1 e^{-i\alpha(n)} c_o^{(1)}(n) \quad (III.23)$$

$$c_g^{(2)}(n) = p_2 e^{-i\alpha(n)} c_o^{(2)}(n) \quad (III.24)$$

Substitutie van (III.23) en (III.24) in (III.20) levert dan

$$p_1 e^{-i\alpha(n)} e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z_{n-1}} c_o^{(1)}(n) + p_2 e^{-i\alpha(n)} e^{2\pi i \gamma_g^{(2)} z_{n-1}} c_o^{(2)}(n) = \psi_g(z_{n-1}) \quad (III.25)$$

Uit (III.19) volgt:

$$c_o^{(2)}(n) = \left\{ \psi_o(z_{n-1}) - c_o^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(1)} z_{n-1}} \right\} e^{-2\pi i \gamma_o^{(2)} z_{n-1}} \quad (III.26)$$

Substitutie van (III.26) in (III.25) levert nu met gebruikmaking van $\gamma_o^{(1)}$, $\gamma_o^{(2)}$, $\gamma_g^{(1)}$ en $\gamma_g^{(2)}$ uit Appendix C:

$$c_o^{(1)}(n) = \frac{\psi_g(z_{n-1}) - p_2 e^{-i\alpha(n)} e^{-2\pi i \gamma_o^{(2)} z_{n-1}} \psi_o(z_{n-1})}{(p_1 - p_2) e^{-i\alpha(n)} e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z_{n-1}}} \quad (III.27)$$

(III.27) is een recursieve betrekking, die voor een bepaald segment n met een bepaalde $\alpha(n)$ de coëfficiënt $c_o^{(1)}(n)$ relateert aan de amplituden van doorgaande en gediffracteerde bundel bij de intrede in het n^e segment (op positie z_{n-1}).

Uit de met (III.27) berekende $c_o^{(1)}(n)$ kunnen met behulp van (III.26), (III.23) en (III.24) de overige coëfficiënten $c_o^{(2)}(n)$, $c_g^{(1)}(n)$ en $c_g^{(2)}(n)$ berekend worden. De amplituden $\psi_o(z_n)$ en $\psi_g(z_n)$ bij het uittreden van de bundel uit het n^e segment worden dan gegeven door

$$\psi_o(z_n) = c_o^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(1)} z_n} + c_o^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_o^{(2)} z_n} \quad (\text{III.28})$$

$$\text{en} \quad \psi_g(z_n) = c_g^{(1)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z_n} + c_g^{(2)}(n) e^{2\pi i \gamma_g^{(2)} z_n} \quad (\text{III.29})$$

welke betrekkingen dan weer fungeren als randvoorwaarden voor de berekening van de coëfficiënten in het $(n+1)^e$ segment. Omdat de randvoorwaarden op $z = 0$, $\psi_o(0) = 1$ en $\psi_g(0) = 0$, bekend zijn, kunnen de amplitudes $\psi_o(z_n)$ en $\psi_g(z_n)$ successievelijk tot op de bodem van het kristal berekend worden. Op de bodem van het kristal kunnen dan door complex kwadrateren de intensiteiten van doorgaande bundel (I_o) en gediffracteerde bundel (I_g) worden berekend. De berekening wordt gedaan voor een groot aantal waarden van de parameter x , zodat het intensiteitsprofiel in de richting evenwijdig aan de g -vector wordt vastgelegd.

Opgemerkt moet worden, dat de stapgrootte in x niets heeft uit te staan met de "kolombreedte". De waarde van x definieert uitsluitend de positie van een kolom. De breedte van een kolom speelt in de hier gegeven theorie geen rol.

III-3b. Toepassing van de Numerieke Methode

Om de in § III-3a genoemde berekeningen uit te voeren werd een computerprogramma samengesteld. De werking van het programma werd getest, door berekende resultaten voor het zuivere moiré-patroon en het perfecte kristal ($x = 0$), voor verschillende waarden van de deviatievector s , te vergelijken met de analytische resultaten (II.18), (II.28), (II.29) en (II.26) (zie ook fig. 2 in hoofdstuk II).

Alle berekeningen werden uitgevoerd aan het 200-moiré-patroon van Cu/Ni. Een segmentgrootte van 5 \AA werd toegepast. Voorts was $z_1 = 1000 \text{ \AA}$ (dikte nikkellaag) en $z_2 = 400 \text{ \AA}$ (dikte koperlaag), $\xi_g = \xi_{200} = 278 \text{ \AA}$ [1], $\xi_g/\xi'_g = 0.08$ en $\xi'_o = \xi'_g/\sqrt{w^2+1}$ [2, 3]. De roosterconstanten van koper en nikkel zijn respectievelijk 3.6150 \AA en 3.5238 \AA [4].

De resultaten van de testprocedure zijn samengevat in de tabellen III.1 en III.2.

Tabel III.1 I_o VOOR EEN PERFECT KRISTAL EN C_T VOOR ZUIVERE MOIRE-PATRONEN ZONDER ANOMALE ABSORPTIE

s	I_o (theoretisch)	I_o (berekend)	C_T (theoretisch)	C_T (berekend)
0	0.9872	0.9859	0.21	0.21
$0.64/\xi_g$	0.9969	0.9876	0.95	0.95
$1.1/\xi_g$	0.5483	0.5507	0.51	0.51
$2.78/\xi_g$	0.9840	0.9825	0.28	0.28

Tabel III.2 I_o en I_g VOOR EEN PERFECT KRISTAL MET ANOMALE ABSORPTIE

s	I_o (theoretisch)	I_o (berekend)	I_g (theoretisch)	I_g (berekend)
0	0.2901	0.2902	0.2127	0.2129
$0.64/\xi_g$	0.6348	0.6309	0.1380	0.1319
$1.1/\xi_g$	0.7163	0.7166	0.1579	0.1584
$2.78/\xi_g$	0.9595	0.9582	0.0163	0.0176

Deze tabellen tonen aan, dat de gevolgde numerieke methode goede resultaten oplevert. De verschillen tussen berekende en theoretische waarden komen naar alle waarschijnlijkheid voort uit de keuze van de stapgrootte, afrondingsfouten tijdens de iteratieve procedure (de berekeningen werden uitgevoerd in enkele precisie) en het verwaarlozen van het imaginair gedeelte in de coëfficiënten $c_o^{(1)}$, $c_o^{(2)}$, $c_g^{(1)}$ en $c_g^{(2)}$ bij het opstellen van de analytische vergelijkingen voor het perfecte kristal met anomale absorptie, (11.28) en (11.29).

In de geruststellende zekerheid, dat het programma betrouwbare uitkomsten oplevert, werden een aantal simulaties gedaan voor een systeem, waarin een diffusiezône was gecreëerd. Aangenomen werd dat het verplaatsingsveld kon worden beschreven met (III.16).

Fig. 3a t/m f geeft het intensiteitsprofiel als functie van x voor symmetrisch rond $z_1 = 1000 \text{ \AA}$ gelegen diffusiezônes met breedten (0 (zuiver moiré-patroon), 160, 320, 480, 640 en 800) \AA . In het laatste geval is juist geen zuiver koper (oorspronkelijke laagdikte 400 \AA) meer aanwezig. Een subprogramma legde in deze diffusiezône een lineair concentratieprofiel (roosterconstanteprofiel). In fig. 3a t/m f is $s = 0$ en is anomale absorptie verwaarloosd. Duidelijk is te zien, dat het moiré-patroon in de buurt van $x = 0$ is verbreed en dat de moiré-spatie voor grote $|x|$ spoedig terugloopt naar de spatie van het zuivere moiré-patroon (69.84 \AA). Dit effect werd reeds voorspeld bij de behandeling van de (falende) kinematische theorie (zie III-2). De fig. 4a t/m f hebben betrekking op dezelfde diffusiegevallen als in fig. 3a t/m f; ook nu is $s = 0$, maar de anomale absorptie is nu in de berekeningen meegenomen. Uit de fig. 4a t/m f is te zien, dat de anomale absorptie met zich meebrengt, dat het profiel rond $x = 0$ schoudervorming vertoont. Dit effect, dat achterwege blijft bij grotere waarden van $|x|$ kan verklaard worden uit het feit, dat de grootte van de anomale absorptie zeer gevoelig is voor kleine variaties in de effectieve deviatieparameter binnen de diffusiezône, juist als deze erg klein is (rond $x = 0$). Voor grotere $|x|$ als $|s_{\text{eff}}| \gg 0$ vindt aan de diffusiezône eigenlijk geen diffractie meer plaats en treedt het genoemde effect dan ook niet op.

Behalve met een lineair concentratieprofiel werden ook nog simulaties gedaan aan "realistischer" concentratieprofielen.

Een subprogramma berekende met een som van errorfuncties [5] de concentratieprofielen, die in een preparaat met $z_1 = 1000 \text{ \AA}$ (dikte nikkellaag) en $z_2 = 400 \text{ \AA}$ (dikte koperlaag) zouden ontstaan na respectievelijk 0.5, 2, 4, 8 en 15 uur diffusie bij een temperatuur, waarbij de (constante) interdiffusiecoëfficiënt $D = 3.4 \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{s}$ werd gesteld. De concentratieprofielen en de bijbehorende moiré-patternen zijn voor $s = 0$ met en zonder anomale absorptie gegeven in fig. 5a t/m e.

III-3c. Discussie aangaande de Simulatieresultaten

Wij constateerden reeds enkele malen (zie § III-2 en § III-3b); dat een merkbare verbreding van het moiré-patroon in simulaties bij $s = 0$ alleen optreedt als $|x|$ klein is. De positie $x = 0$ (beschreven in § III-1) kenmerkt zich door het feit, dat zowel de diffracterende vlakken van de oorspronkelijke componenten van het epitactische bikristal, als de effectief diffracterende vlakken in de diffusiezône juist in elkaars verlengde liggen. Nu laat de door ons gegeven beschrijvingswijze van het verplaatsingsveld in de diffusiezône (III.1) niet toe, dat deze situatie zich herhaalt. Een rooster, dat aldus opgebouwd wordt gedacht, bevat echter een zeer grote misfit-energie; deze misfit-energie kan echter sterk gereduceerd worden, indien de structuur van de diffusiezône wordt gerelaxeerd door de aanwezigheid van misfit-dislocaties.

Aangetoond is, dat in het grensvlak van epitactische bikristallen ook vóór diffusie een netwerk van dergelijke misfit-dislocaties aanwezig is [6, 7]. Volgens theorieën van van der Merwe en Vermaak [7, 8, 9] verspreiden de misfit-dislocaties zich na diffusie over subgrensvlakken in de diffusiezône en wel zodanig, dat de totale hoeveelheid misfit-dislocaties constant blijft totdat de diffusiezône het oppervlak van van één van de componenten van het diffusiekoppel heeft bereikt. Het effect van de aanwezigheid van misfit-dislocaties in de diffusiezône is, dat een situatie als rond $x = 0$ zich vaak herhaalt. Voor de simulaties betekent dit, dat de fasefactor $\alpha(z, x)$ in de diffusiezône alleen voor kleine $|x|$ beschreven kan worden met

$$\alpha(z, x) = -2\pi \frac{d(z) - d(z=0)}{d(z)d(z=0)} x$$

Voor grotere waarden van $|x|$ moet na diffusie het verplaatsingsveld ten gevolge van de misfit-dislocaties worden ingevoerd. Het resultaat van een dergelijke verfijning in de theorie zou zijn, dat voor kleine waarden van $|x|$ verbreding van het moiré-patroon plaats vindt, zoals in ons primitieve model geconstateerd, terwijl nu ook voor grote waarden van $|x|$ verbreding van het moiré-patroon geconstateerd zal worden daar de effectief scheefstaande vlakken (zie modelbeschrijving in § III-1 en discussie in § III-2) niet voorkomen.

Onze experimenten (zie hoofdstuk V) hebben inderdaad aangetoond dat moiré-patronen na diffusie een grotere spatie hebben dan voor diffusie. Bovendien zijn variaties in deze spatie aantoonbaar.

Wij maten de spatie op van ca. (3-10) fringes en bepaalden daaruit de gemiddelde spatie van het moiré-patroon. Het moet niet uitgesloten worden geacht, dat de door ons herhaaldelijk waargenomen "coherentie-afstand" van de fringes van ca. (3-10) moiré-perioden met de hierboven beschreven misfit-relaxatie samenhangt.

III-4. Ons Model: de Gemiddelde-Rooster-Benadering

Bij ons onderzoek naar de verandering van moiré-patronen ten gevolge van diffusie, zijn wij vooral geïnteresseerd in de spatieverandering en niet in de eerste plaats in de verandering van het contrast van de moiré-patronen, aangezien deze laatste sterk afhankelijk is van de diffractiecondities, welke niet exact bleken te kunnen worden bepaald (zie § IV-4).

In de discussie in § III-3c maakten wij reeds melding van het feit, dat de structuur van de diffusiezône, niettegenstaande de concentratiegradiënt, door de aanwezigheid van een periodieke misfit-dislocatiestructuur, in richtingen loodrecht op die van de concentratiegradiënt, een hoge periodiciteit bezit.

Dit brengt ons op het idee, dat het moiré-patroon na diffusie bij goede benadering kan worden opgevat als de afbeelding van het coïncidentie-rooster (zie hoofdstuk I) van twee gemiddelde roosters. Het zal later blijken (hoofdstuk V), dat deze "gemiddelde-rooster-benadering" het door ons experimenteel vastgestelde verband tussen de moiré-spatie enerzijds en de breedte van de diffusiezône anderzijds zowel kwalitatief als kwantitatief uitstekend beschrijft.

In fig. 6a zijn twee overlappende roosters van de kristallen A en B met dikten van resp. z_1 en z_2 weergegeven; de spaties van de diffracterende vlakken van A en B zijn respectievelijk d_1 en d_2 .

Als nu tussen A en B interdiffusie plaatsvindt ontstaat rond $z = z_1$ een diffusiezône (fig. 6b).

Als wordt aangenomen, dat de interdiffusiecoëfficiënt van het systeem A/B constant is, de wet van Vegard in het gehele samenstellingsgebied van de homogene A/B legeringen opgaat en het concentratieprofiel in de diffusiezône kan worden benaderd met een rechte, dan is het roosterconstanteprofiel na diffusie, als geschetst in fig. 6b; verondersteld is hierbij, dat $d_1 < d_2$. De moiré-spatie vóór diffusie is die van het zuivere moiré-patroon:

$$M_T = \frac{d_1 d_2}{d_2 - d_1} \quad (III.30)$$

Onze "gemiddelde-rooster-benadering" stelt nu, dat de spatie van het moiré-patroon na diffusie kan worden beschreven met

$$M_D = \frac{\langle d_1 \rangle \langle d_2 \rangle}{\langle d_2 \rangle - \langle d_1 \rangle} \quad (III.31)$$

waarbij $\langle d_1 \rangle$ en $\langle d_2 \rangle$ gemiddelde roosterparameters in de lagen ter dikte z_1 en z_2 respectievelijk zijn. Indien de roosterconstanten d_1 en d_2 niet erg verschillen, geldt

$$\langle d_1 \rangle \langle d_2 \rangle \approx d_1 d_2 \quad (III.32)$$

Nu is voor het hierboven beschreven eenvoudige diffusiemodel met een lineair concentratieprofiel in een diffusiezône met breedte Δp :

$$\langle d_1 \rangle = \frac{1}{z_1} \int_0^{z_1} d(z) dz = \frac{z_1 d_1 + \frac{1}{8} \Delta p (d_2 - d_1)}{z_1} \quad (III.33)$$

$$\langle d_2 \rangle = \frac{1}{z_2} \int_{z_1}^{z_1 + z_2} d(z) dz = \frac{z_2 d_1 + (z_2 - \frac{\Delta p}{2}) (d_2 - d_1) + \frac{3}{8} \Delta p (d_2 - d_1)}{z_2} \quad (III.34)$$

Uit (III.33) en (III.34) volgt:

$$\langle d_2 \rangle - \langle d_1 \rangle = (d_2 - d_1) \left\{ 1 - \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) \Delta p \right\} \quad (III.35)$$

Nu volgt uit (III.30), (III.31) en (III.32)

$$\frac{M_T}{M_D} = \frac{\langle d_2 \rangle - \langle d_1 \rangle}{d_2 - d_1} \quad (III.36)$$

Combinatie van (III.36) en (III.35) levert:

$$\frac{M_T}{M_D} = 1 - \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) \Delta p \quad (III.37)$$

Nu kan (III.37) ook geschreven worden als:

$$\frac{M_D - M_T}{M_D} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) \Delta p \quad (III.38)$$

Voor een kleine diffusiezone Δp neemt (III.38) de vorm aan van een differentiaalvergelijking:

$$\frac{dM}{M} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) dp \quad (III.39)$$

Deze differentiaalvergelijking met als randvoorwaarde $M = M_T$ voor $p = 0$ heeft als oplossing:

$$\ln \frac{M}{M_T} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) p \quad (III.40)$$

We zien, dat voor de genoemde aannamen de variatie van de moiré-spatie met de breedte van de diffusiezone een zeer eenvoudige gedaante heeft.

De verhouding M/M_T blijkt afhankelijk van de verhoudingen p/z_1 en p/z_2 , waarbij de grootte van het effect bepaald wordt door de kleinste z , hetgeen zeer voor de hand ligt.

Stellen we nu nog:

$$p^2 = 2Dt \tag{III.41}$$

waarin D de (constante) interdiffusiecoëfficiënt en t de diffusieduur is, dan vinden we een felbegeerd verband tussen de moiré-spatie na diffusie enerzijds en diffusiegegevens D en t anderzijds.

De uit (III.40) en (III.41) volgende betrekking:

$$\ln \frac{M}{M_T} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) \sqrt{2Dt} \tag{III.42}$$

voorspelt:

- a. een lineair verband tussen $\ln(M/M_T)$ en \sqrt{t} bij interdiffusie in een epitactisch bikristal.
- b. de mogelijkheid om, indien z_1 en z_2 bekend zijn, uit de helling van de onder a genoemde rechte de bulkdifusiecoëfficiënt bij lage temperatuur in zeer dunne folies te bepalen.

Deze voorspellingen zijn door onze experimenten (zie hoofdstuk V) op schitterende wijze bevestigd.

Natuurlijk is het mogelijk de in deze paragraaf gegeven afleiding te verfijnen door toepassing van een niet recht concentratieprofiel. Wij zijn echter van mening, dat deze verfijning slechts leidt tot "minor corrections" op (III.42) en het succes van de "gemiddelde-roosterbenadering" onaangetast laat.

Het nu volgende moge dienen tot rechtvaardiging van de "gemiddelde-roosterbenadering": In de diffusiezône zijn misfit-dislocaties van tegengesteld teken aanwezig zodanig, dat in het matanovlak, de verplaatsingsvelden van deze misfit-dislocaties elkaar juist opheffen. Het rooster op dit matanovlak - in onze eenvoudige beschrijving (concentratieonafhankelijke diffusiecoëfficiënt) het vlak $z = z_1$ - kan dienen als referentierooster ten opzichte waarvan de gemiddelde fase van de gediffracteerde electronen in het bovenste en in het onderste gedeelte van het gediffundeerde systeem kan worden uitgedrukt.

*wordt
reveren?*

*in richt-
misfit
& doet ook
feite*

Voor het bovenste gedeelte ($z \leq z_1$) volgt voor de gemiddelde fase ((III.15) en (III.16)):

$$\langle i\alpha_2(x) \rangle = -2\pi i \left(\frac{1}{\langle d_1 \rangle} - \frac{1}{d(z_1)} \right) x \quad (\text{III.42})$$

en voor het onderste gedeelte ($z \geq z_1$):

$$\langle i\alpha_2(x) \rangle = -2\pi i \left(\frac{1}{\langle d_2 \rangle} - \frac{1}{d(z_1)} \right) x \quad (\text{III.43})$$

zodat op het vlak $z = z_1$, analoog als beschreven in hoofdstuk II, een fasesprong optreedt, voor de grootte waarvan, onder toepassing van (III.32), geldt:

$$i(\langle \alpha_2(x) \rangle - \langle \alpha_1(x) \rangle) = -2\pi i \left(\frac{\langle d_1 \rangle - \langle d_2 \rangle}{d_1 d_2} \right) x$$

Deze fasefactor nu geeft aanleiding tot α -fringes (§ II-2) met de periode:

$$M = \frac{d_1 d_2}{\langle d_2 \rangle - \langle d_1 \rangle}$$

Dit is identiek aan de moiré-spatie na diffusie zoals gedefinieerd in (III.31).

Literatuur

- [1] Hirsch, P.B., Howie, A., Whelan, M.J., Nicholson, R.B. & Pashley, D.W.
Electron Microscopy of Thin Crystals, pp 496, Londen (Butterworths),
1965.
- [2] Head, A.K., Humble, P. Clarebrough, L.M., Morton, A.J. & Forwood, T.
Computed Electron Micrographs and Defect Identification, pp 16, 84,
Amsterdam (North-Holland), 1973
- [3] Radi, G.
Acta Cryst. A 26, 41 (1970)
- [4] Hodgman, C.D.
Handbook of Chemistry and Physics, Cleveland (Ohio) (The Chemical
Rubber Publishing Co), 1960
- [5] Crank, J.
The mathematics of diffusion, p. 15, Oxford at the Clarendon Press,
1956
- [6] Matthews, J.W.
Phil. Mag. 6, 1347 (1961)
- [7] Van der Merwe, J.H.
in Treatise on Materials Science and Technology ed. by H. Herman,
New York (Academic Press), 1973
- [8] Vermaak, J.S. & Van der Merwe, J.H.
Phil. Mag. 10, 785 (1964)
- [9] Vermaak, J.S. & Van der Merwe, J.H.
Phil. Mag. 12, 453 (1965).

FIGUREN BIJ HOOFDSTUK III

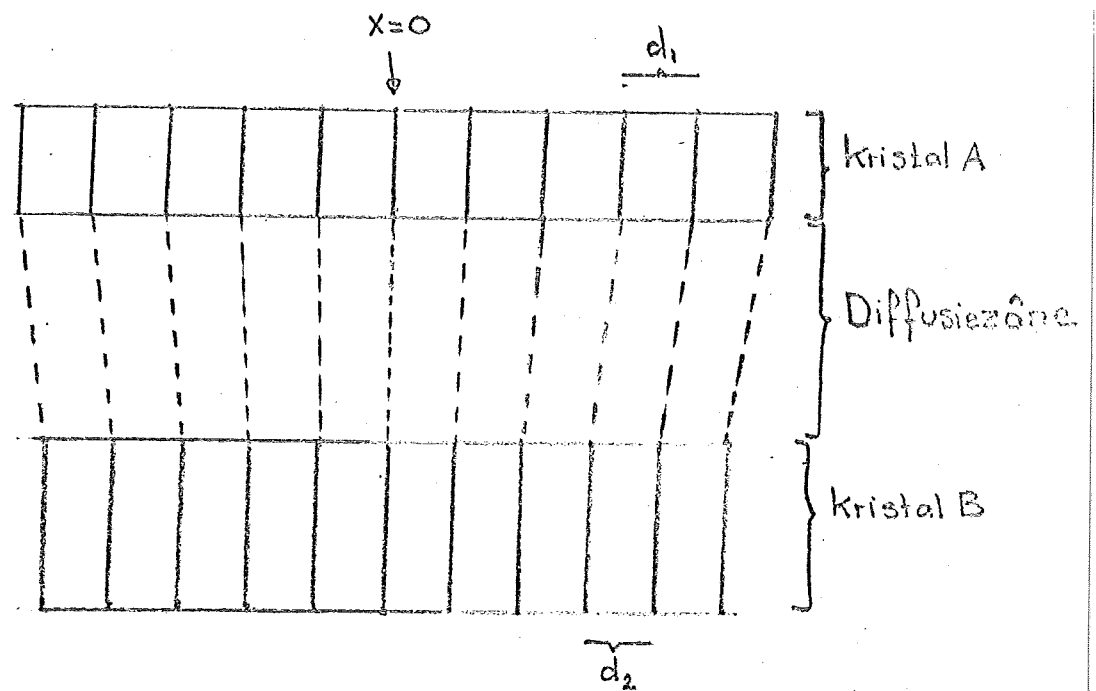


Fig 1 Roostervlakken in een Diffusiezône

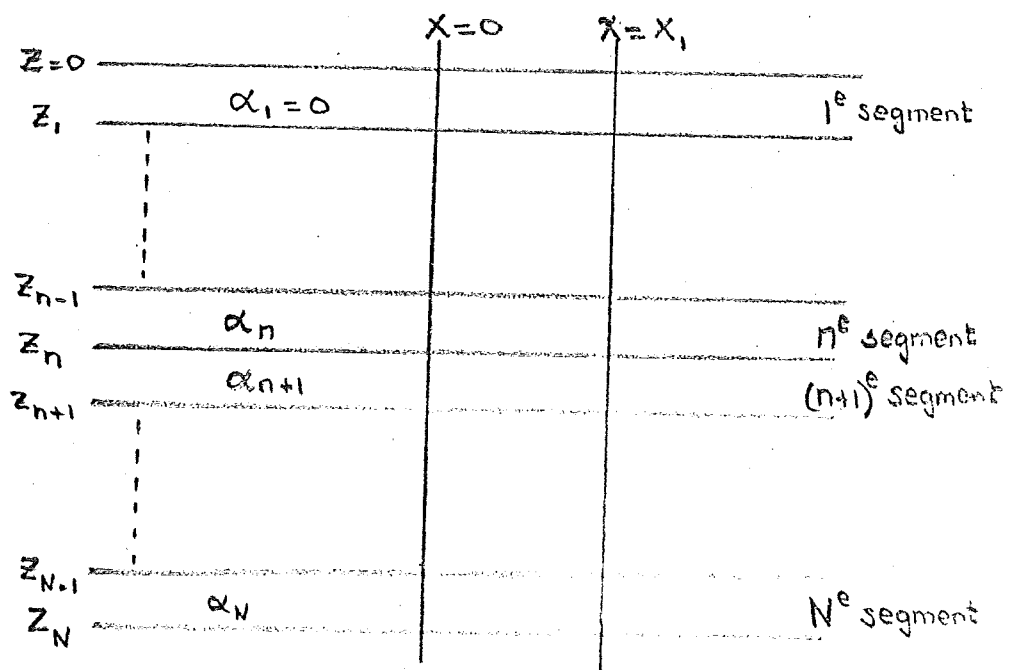


Fig 2 Kolommen en Segmenten

Bij fig. 3: $s = 0$

p = breedte van de diffusiezône (lineair concentratieprofiel);
geen rekening gehouden met anomale absorbtie

Bij fig. 4: als boven, maar wel rekening gehouden met anomale absorbtie

Bij fig. 5: $s = 0$

concentratieprofielen vastgelegd met som van errorfuncties [5]

t = diffusieduur

weergegeven zijn:

- (i) het concentratieprofiel in een kolom
- (ii) het moiré-patroon berekend met anomale absorbtie;
naast het bovengenoemde concentratieprofiel
- (iii) het moiré-patroon berekend zonder anomale absorbtie:
op de volgende pagina

Fig. 3a
 $P = 0A$

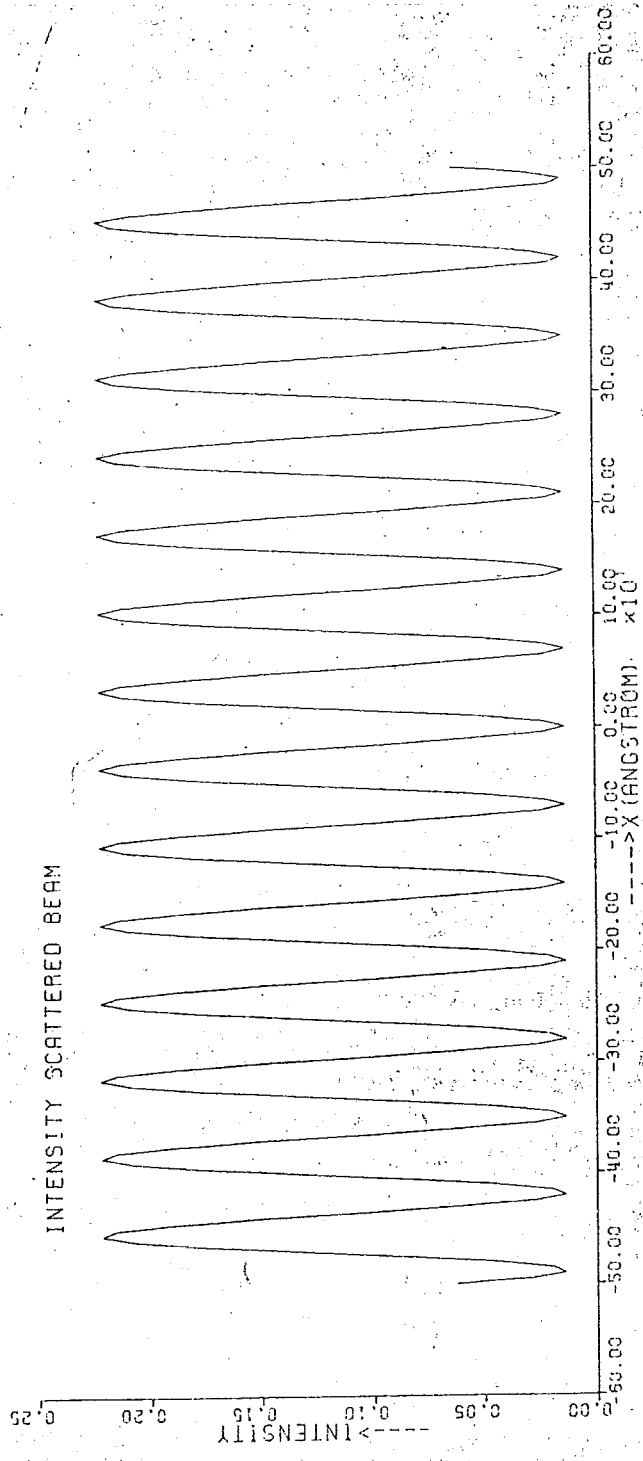
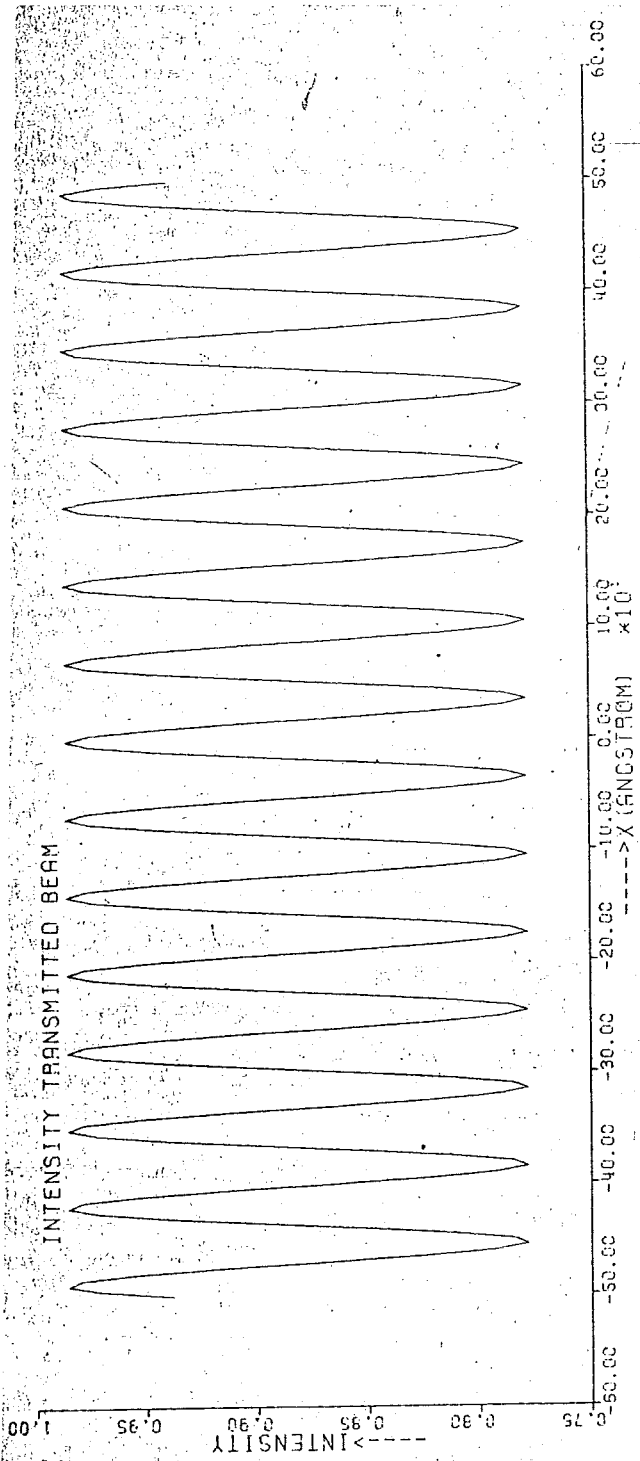


Fig. 3b
 $p = 160 \text{ \AA}$

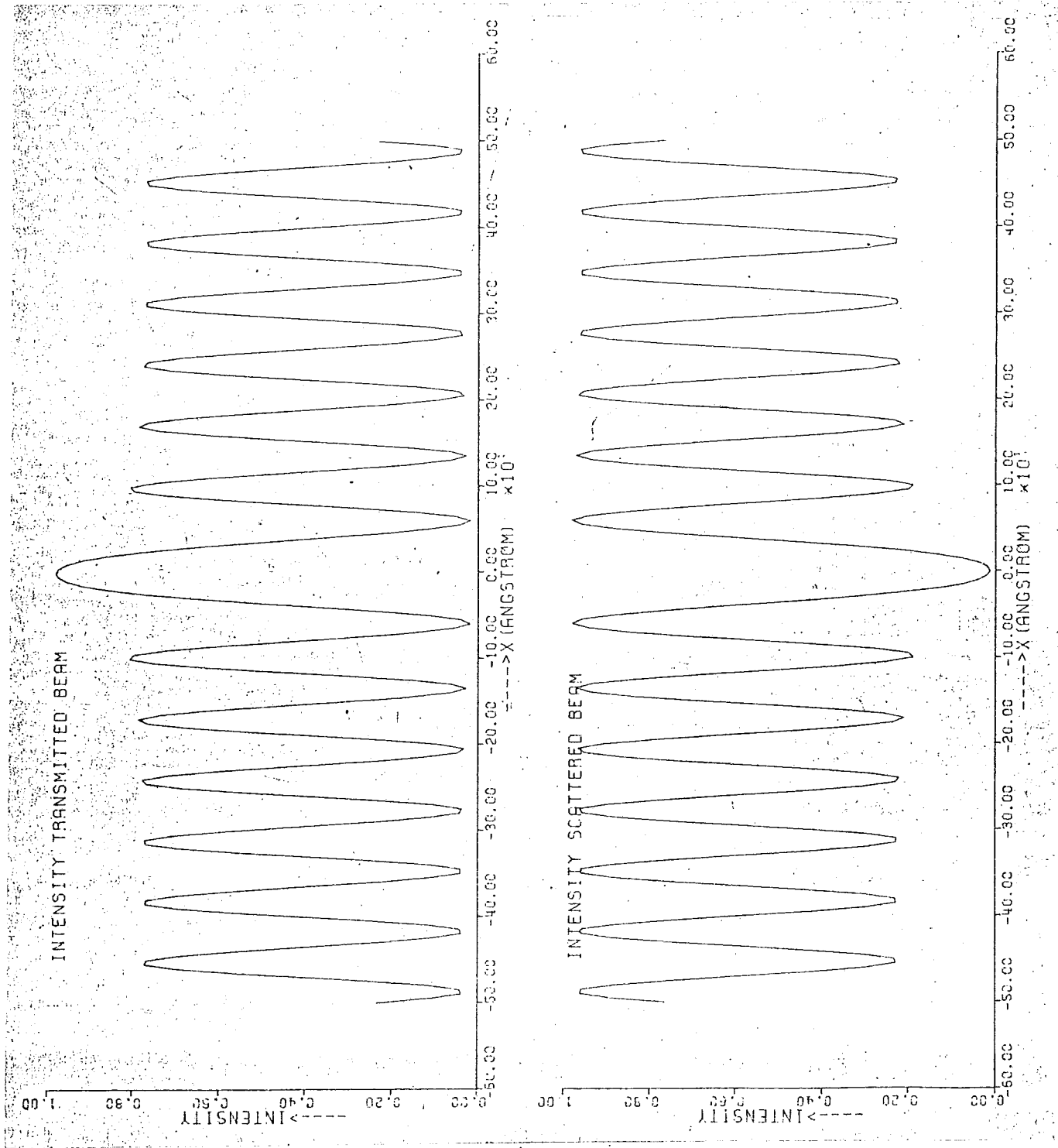
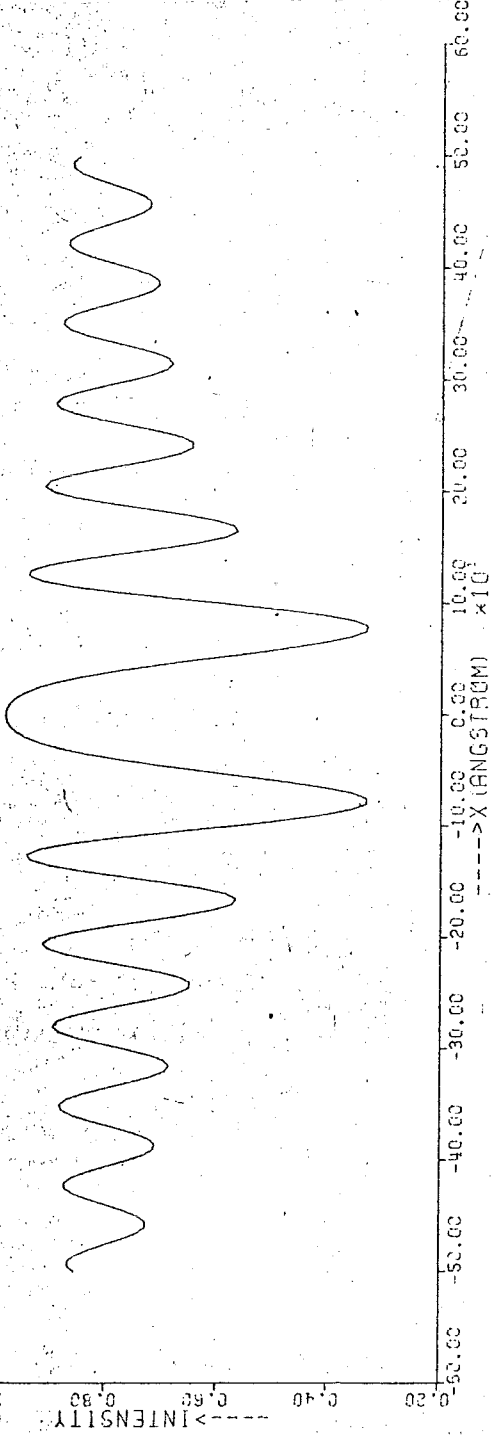
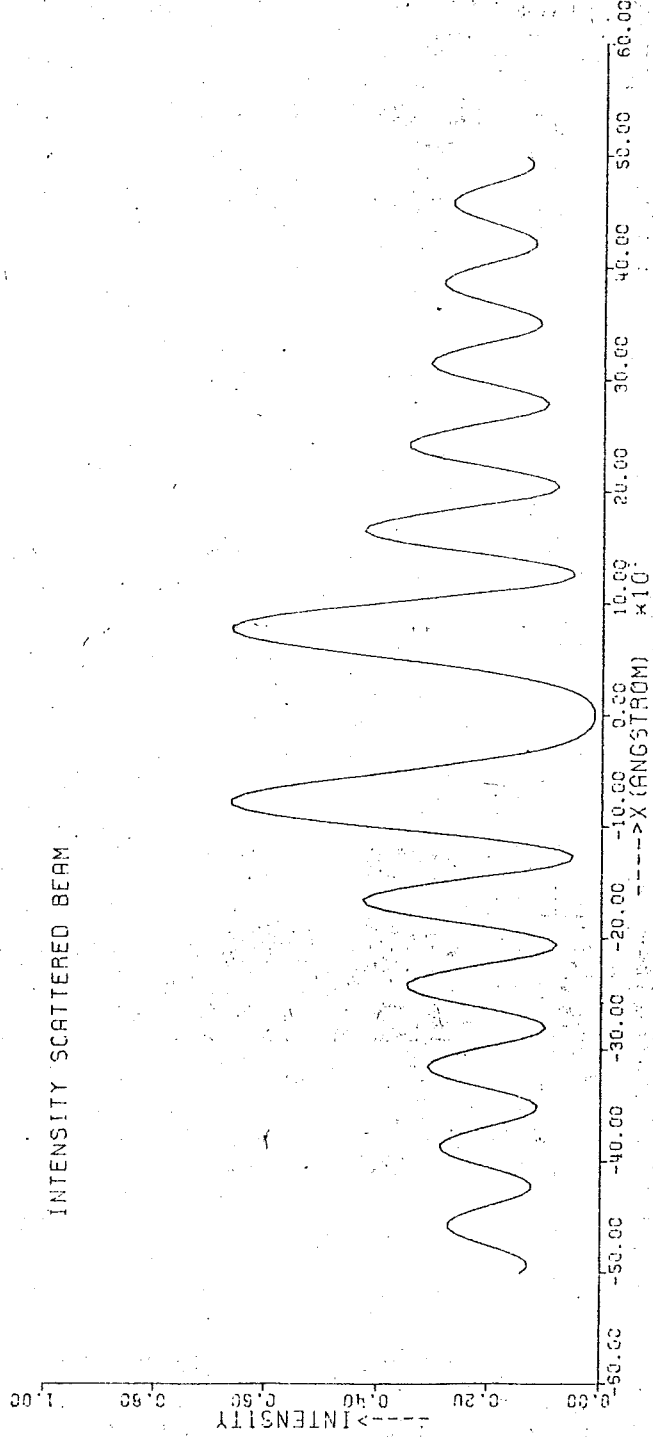


Fig. 3c
 $\rho = 320 \text{ \AA}$

INTENSITY TRANSMITTED BEAM



INTENSITY SCATTERED BEAM



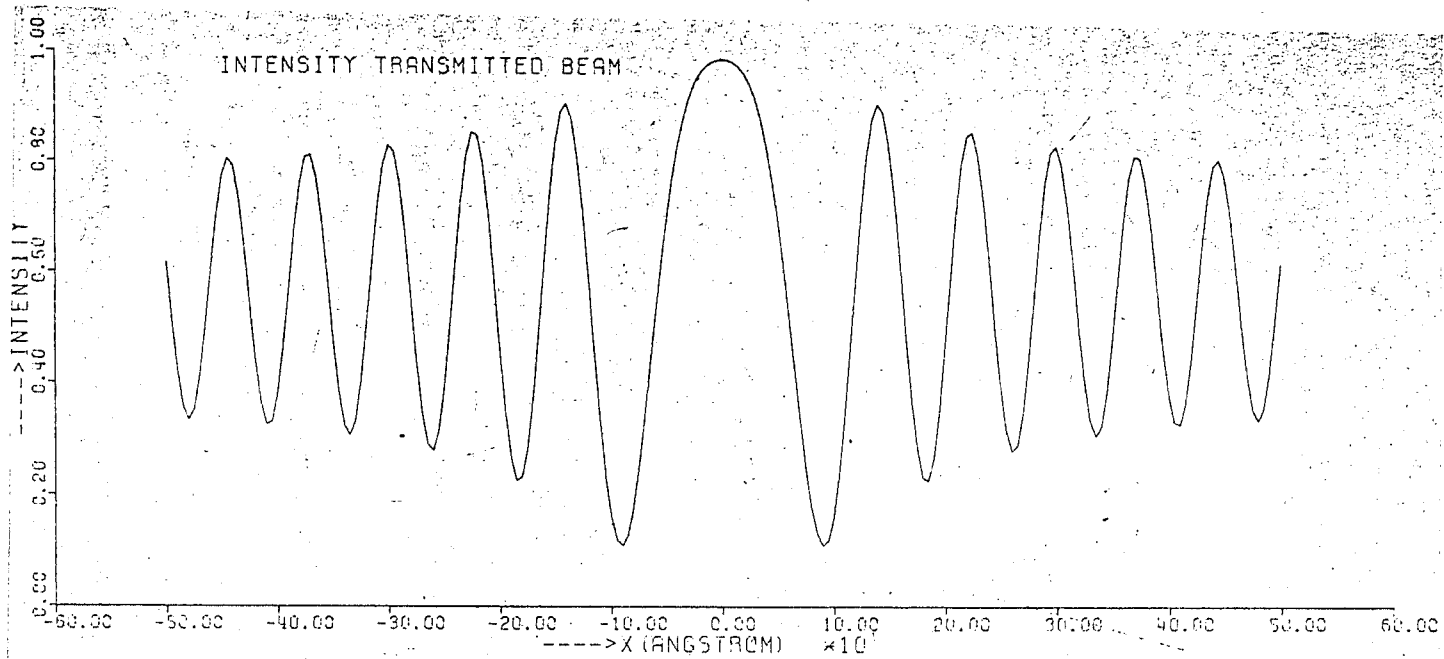


Fig. 3 d
 $p = 480 \text{ \AA}$

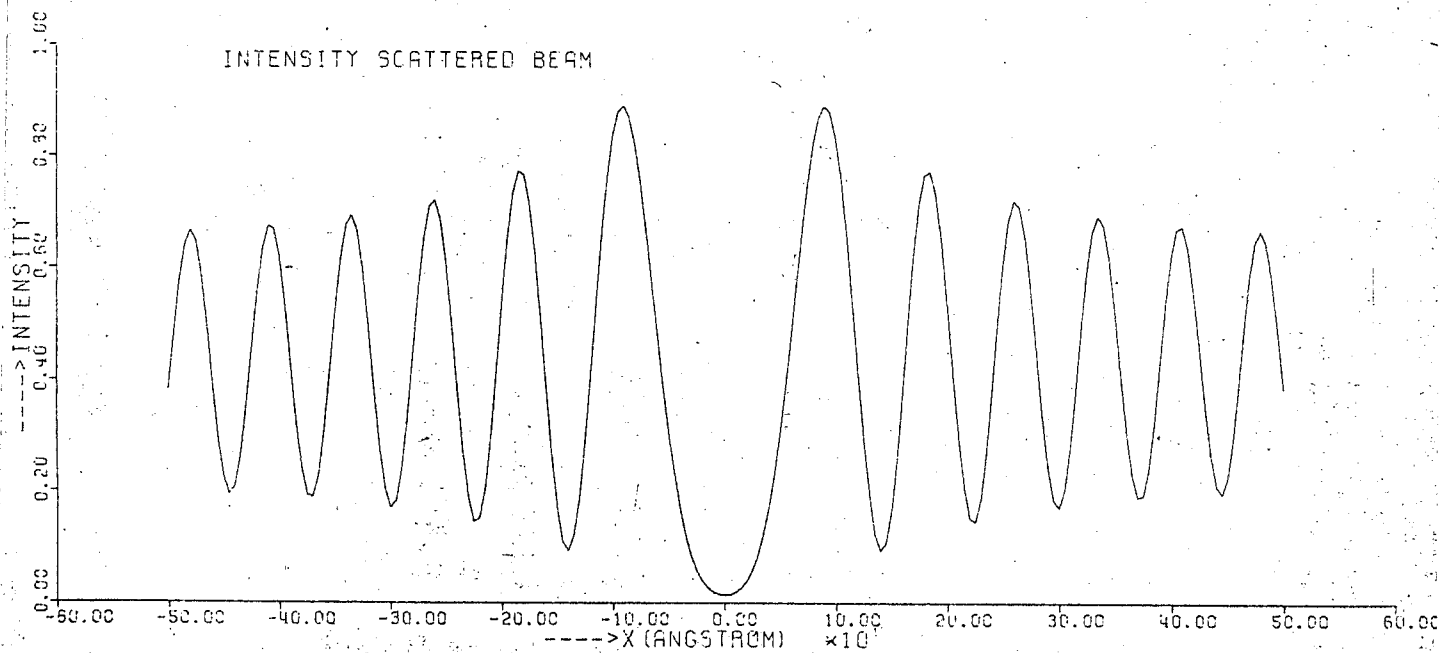


Fig. 3e
 $p = 640 \text{ \AA}$

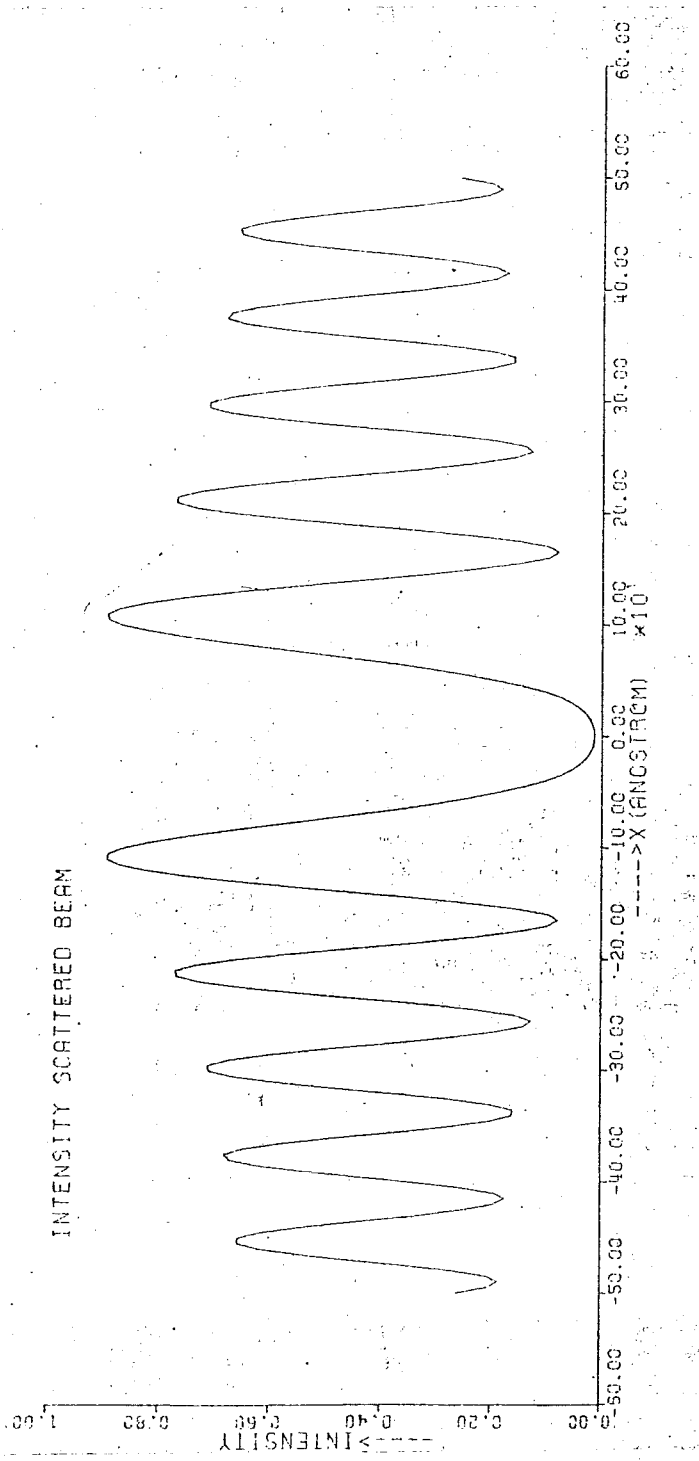
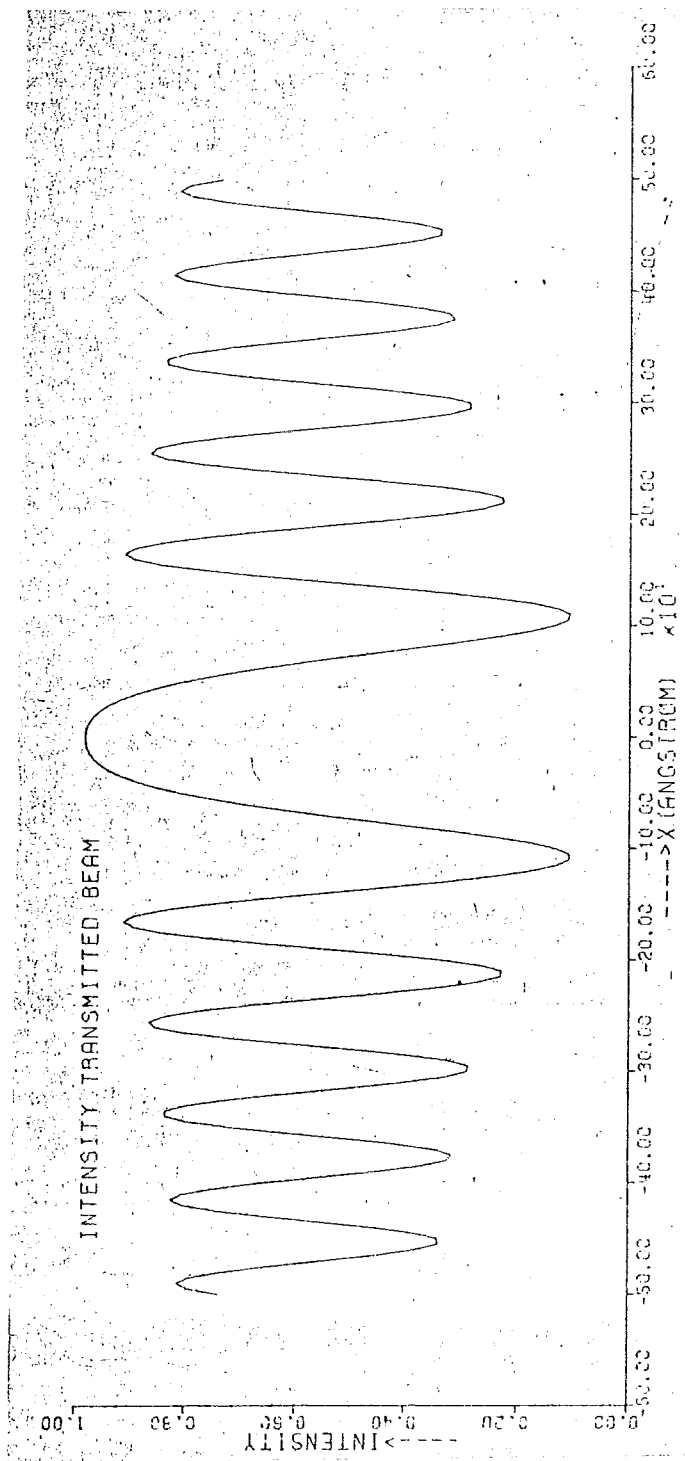


Fig. 3 f
 $\rho = 0.008$

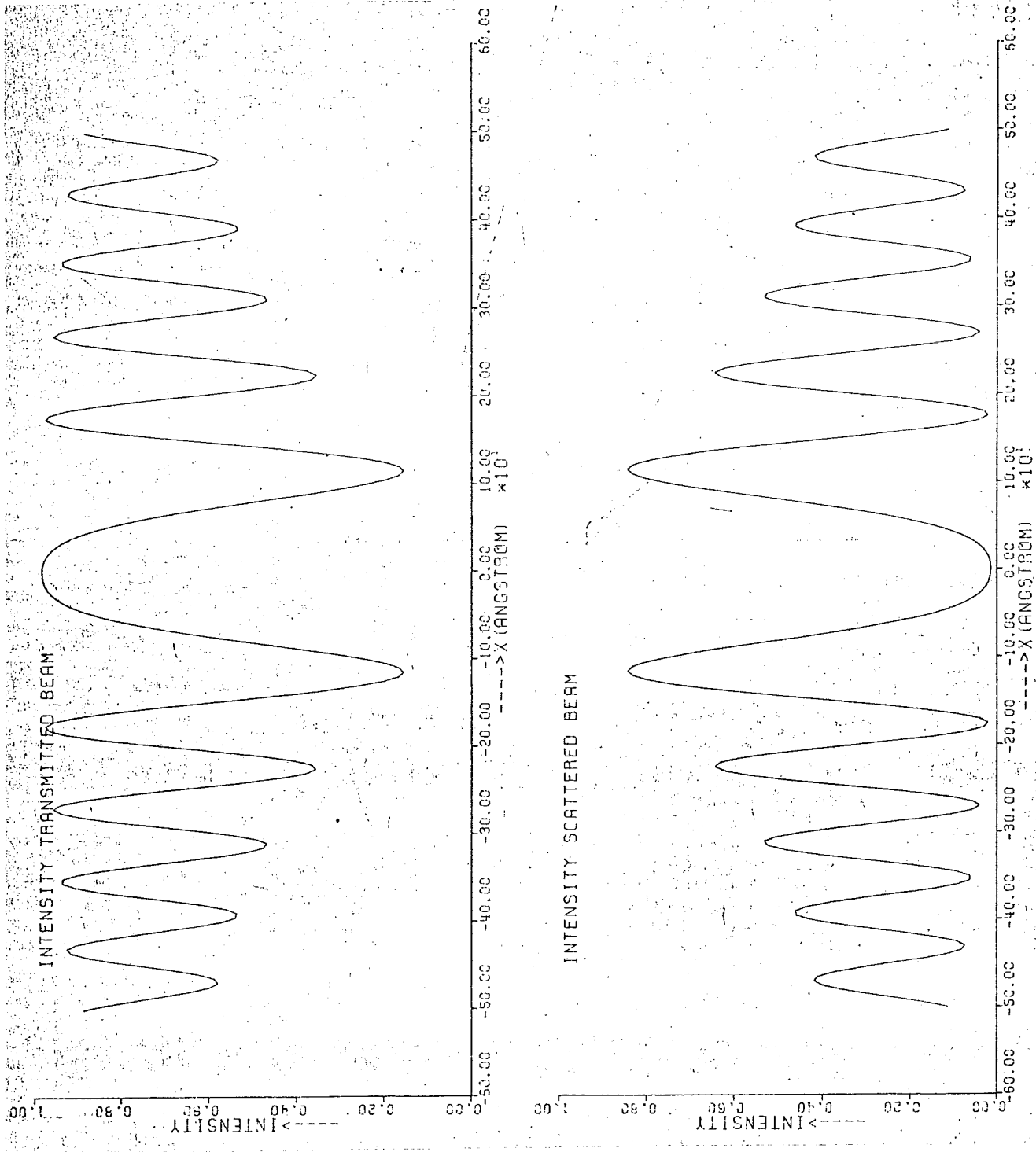


Fig. 4a
 $p = 0.8$

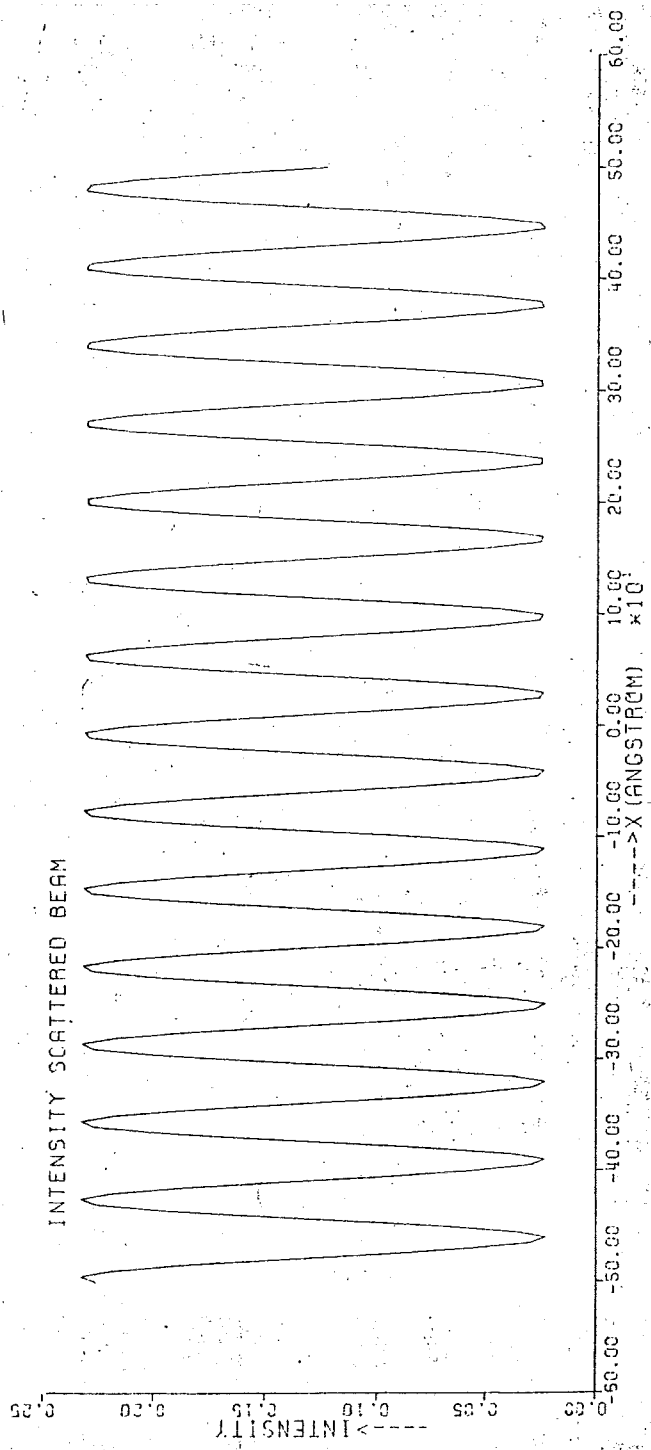
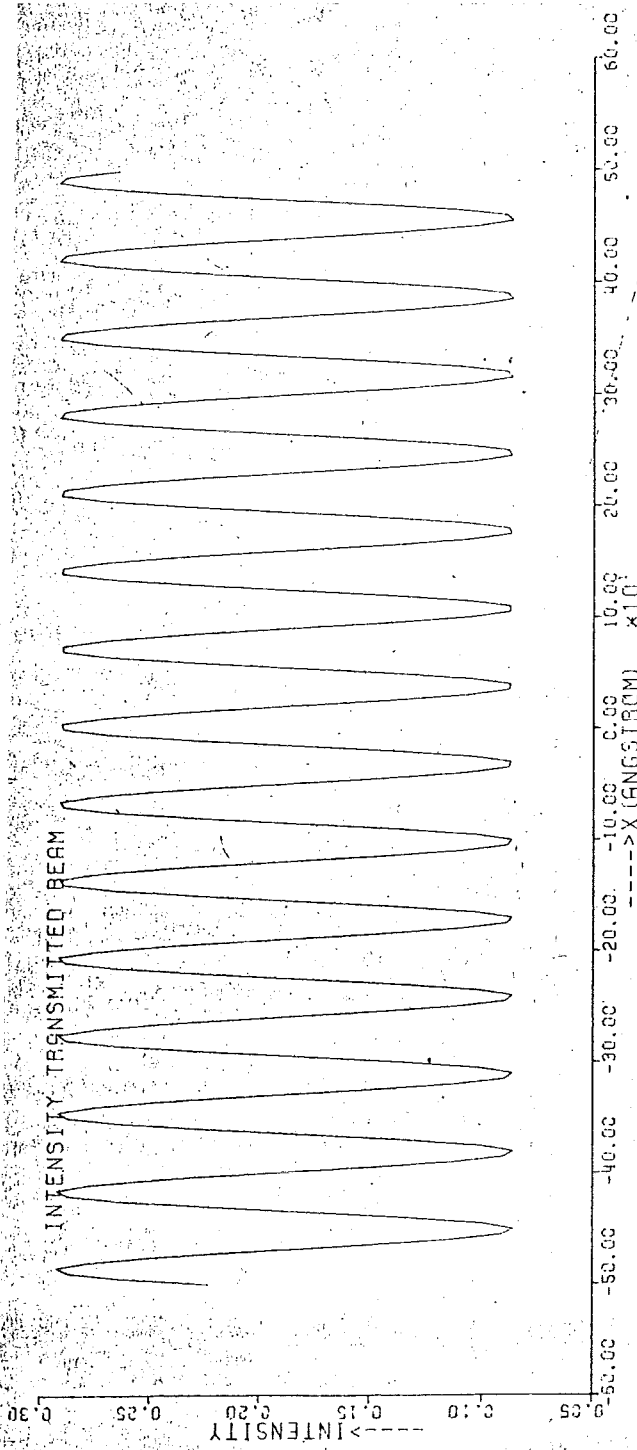
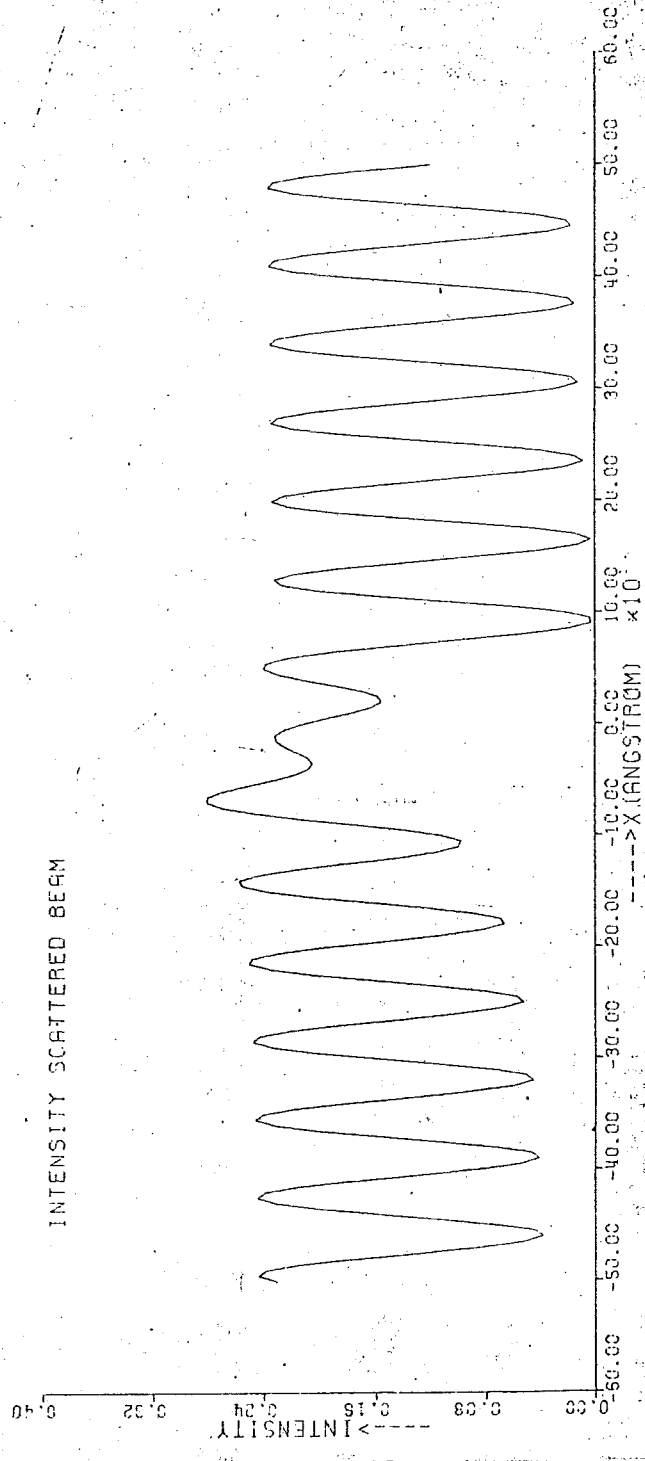
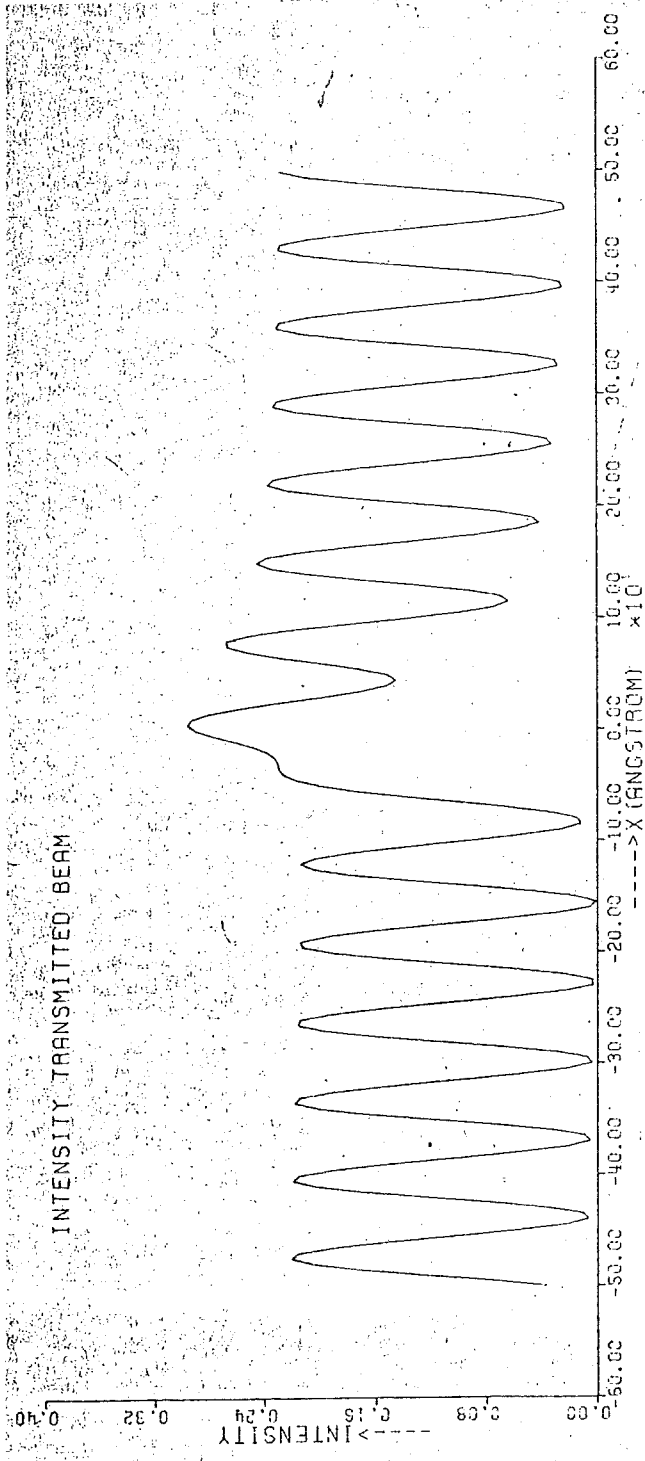


Fig. 4b
 $\rho = 160^\circ$



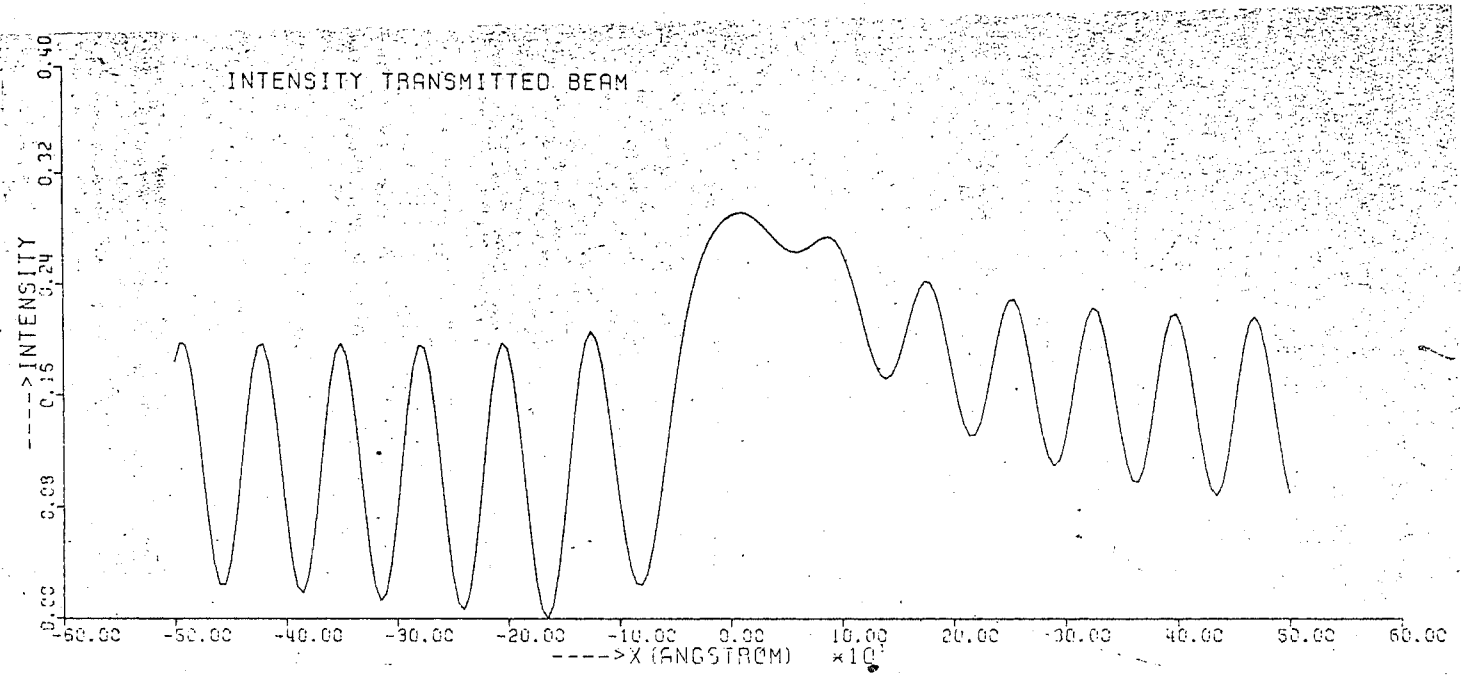
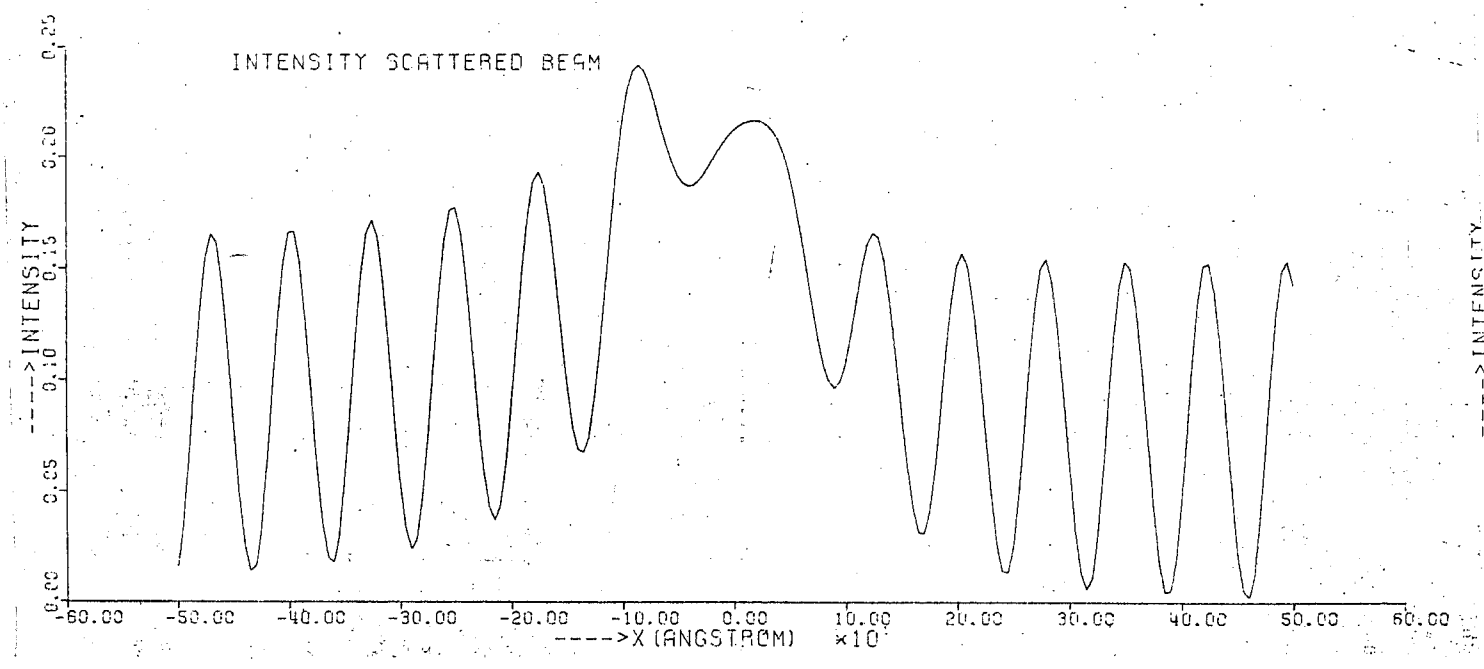


Fig 4c
 $p = 320 \text{ \AA}$



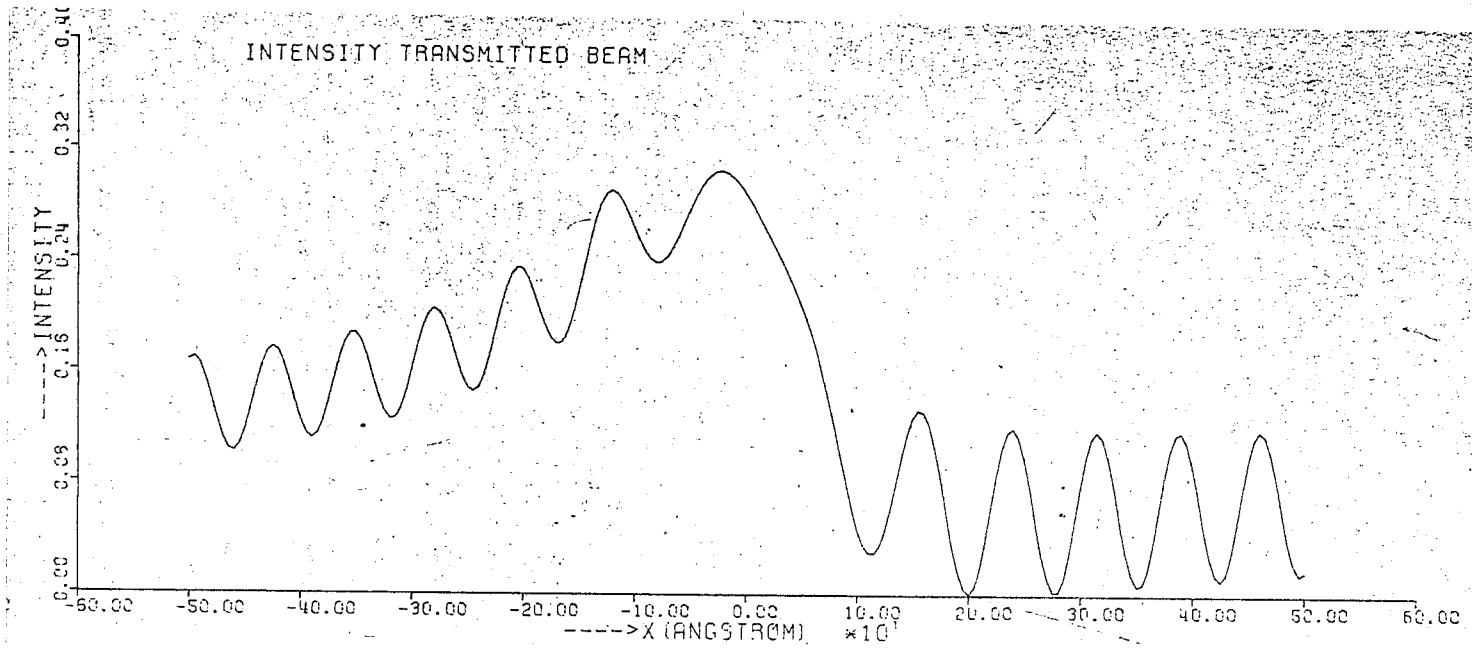


Fig. 4d
 $p = 480 \text{ \AA}$

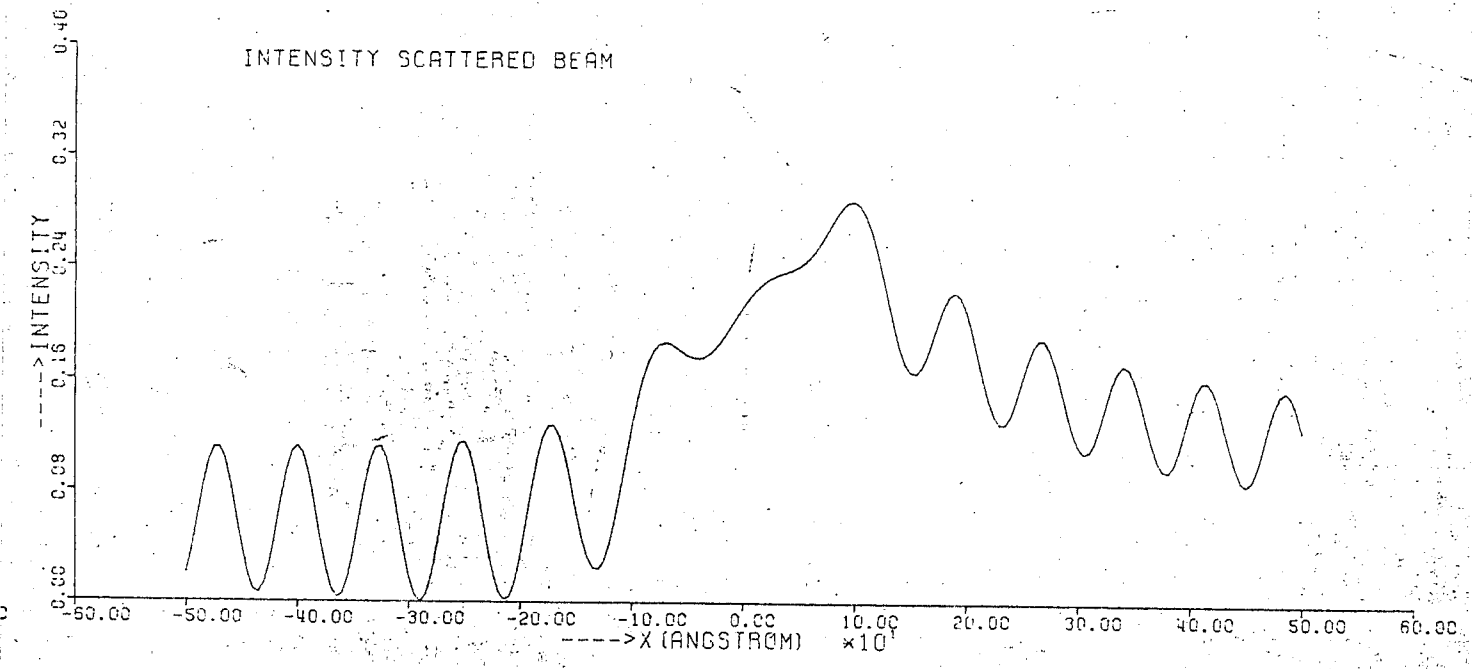


Fig. 4e
 $p = 640 \text{ \AA}$

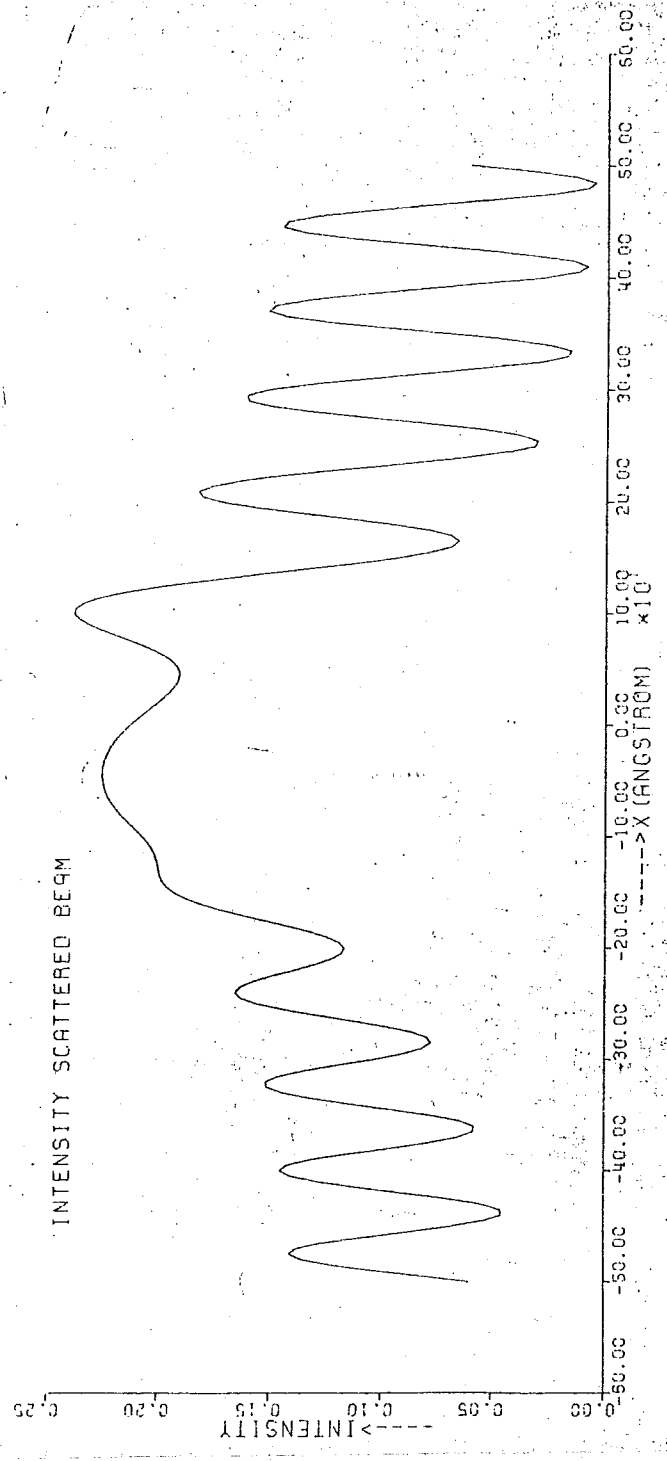
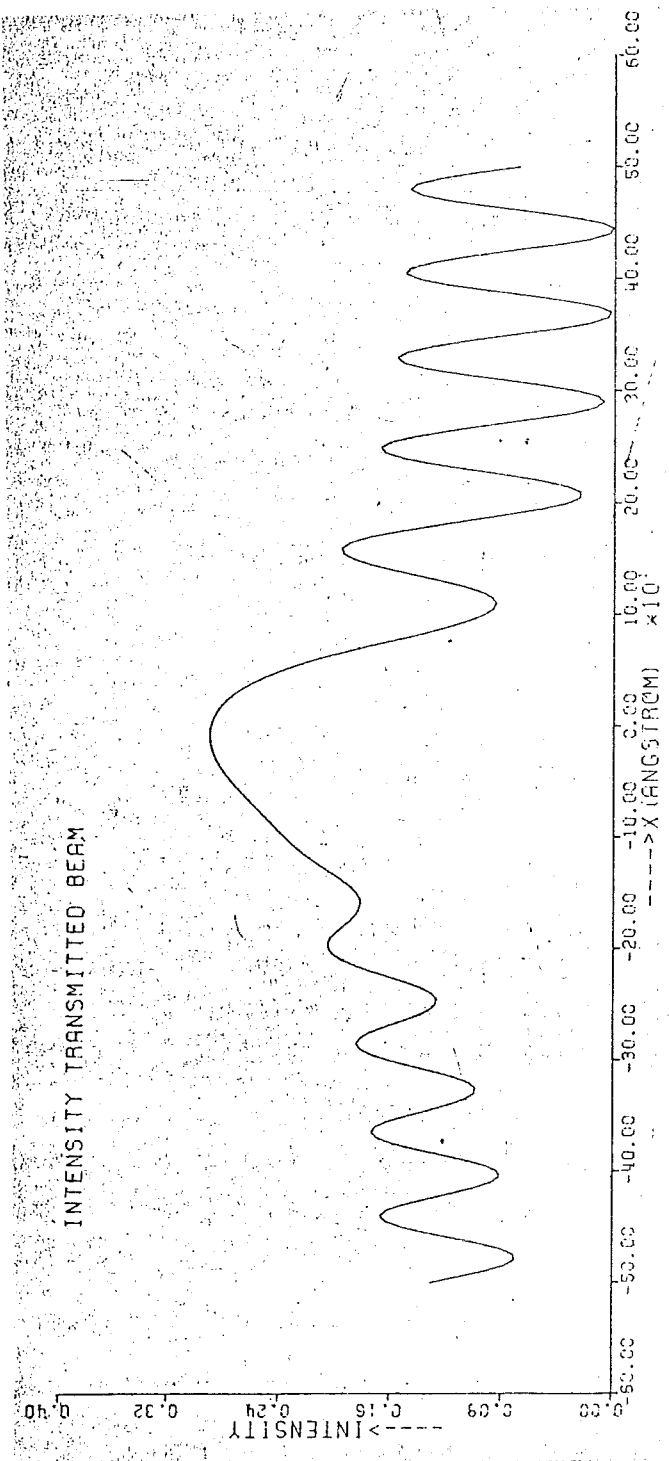


Fig. 41
 $P = 800 \text{ \AA}$

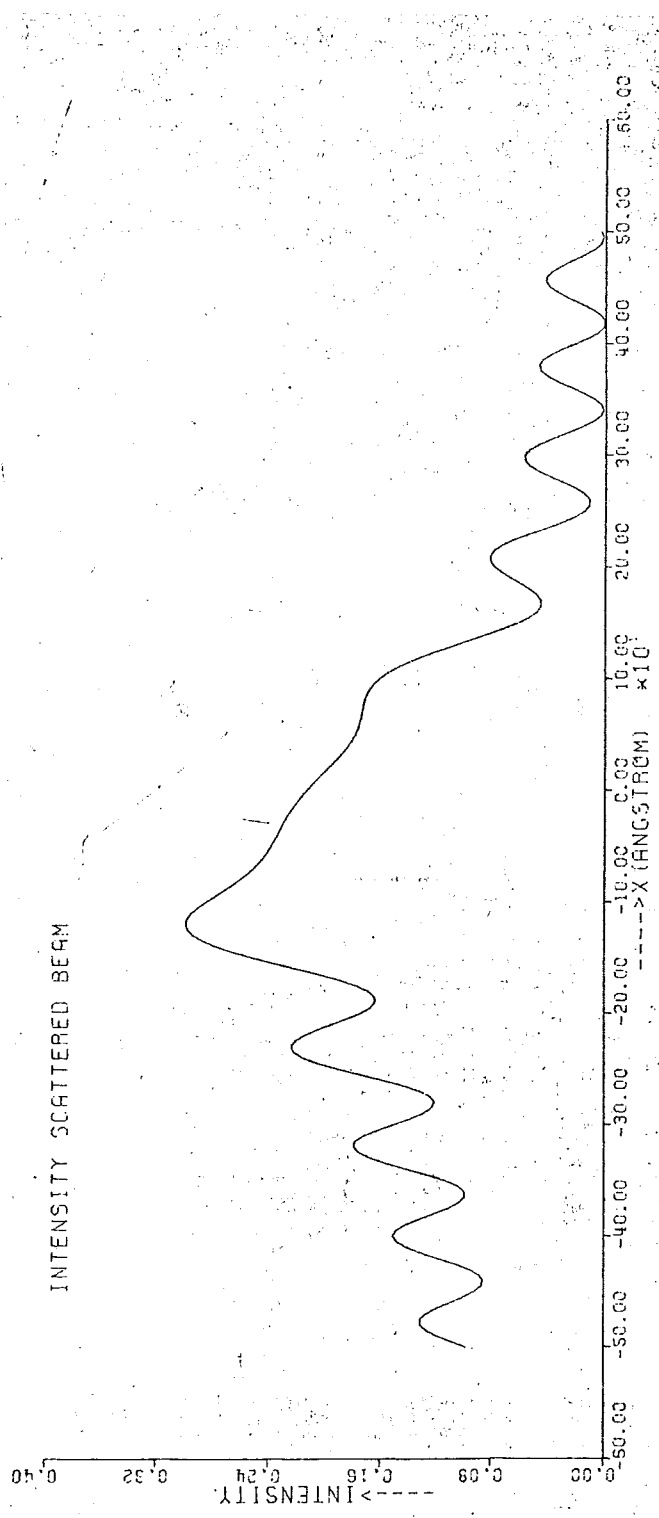
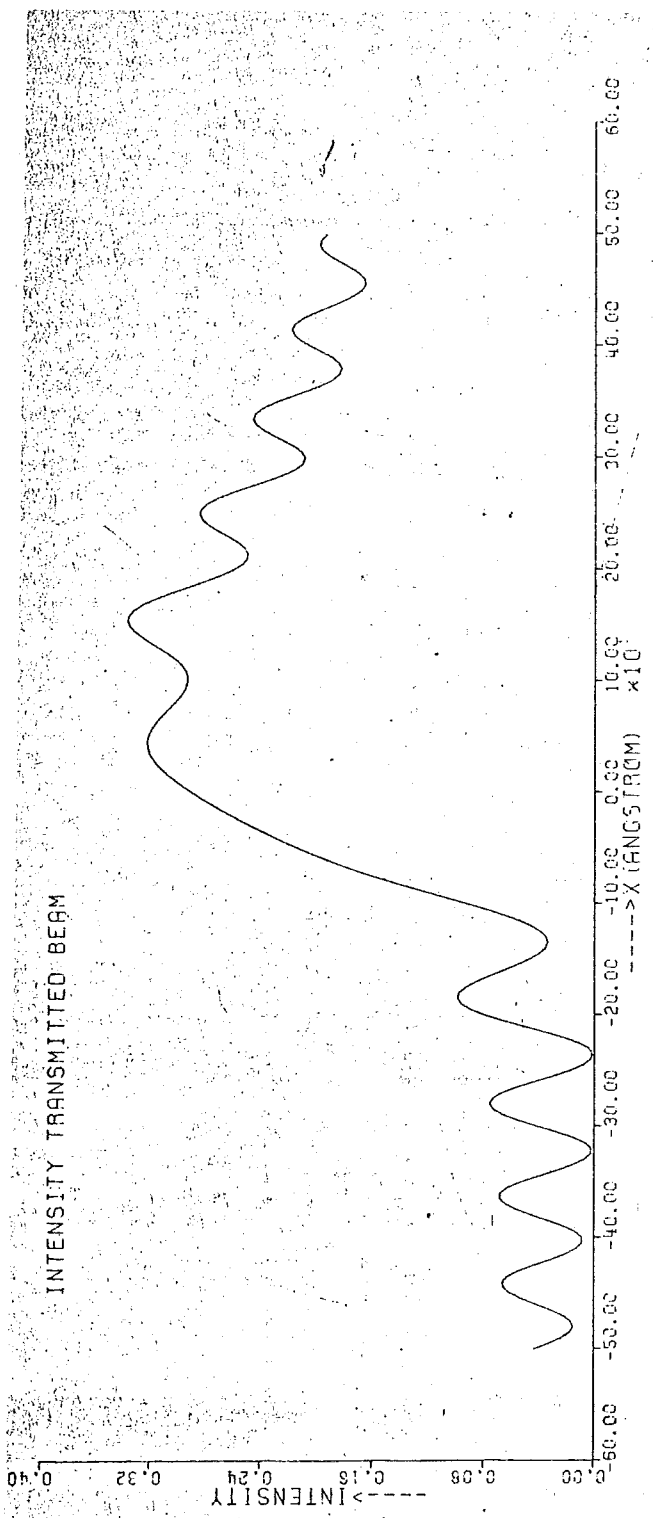
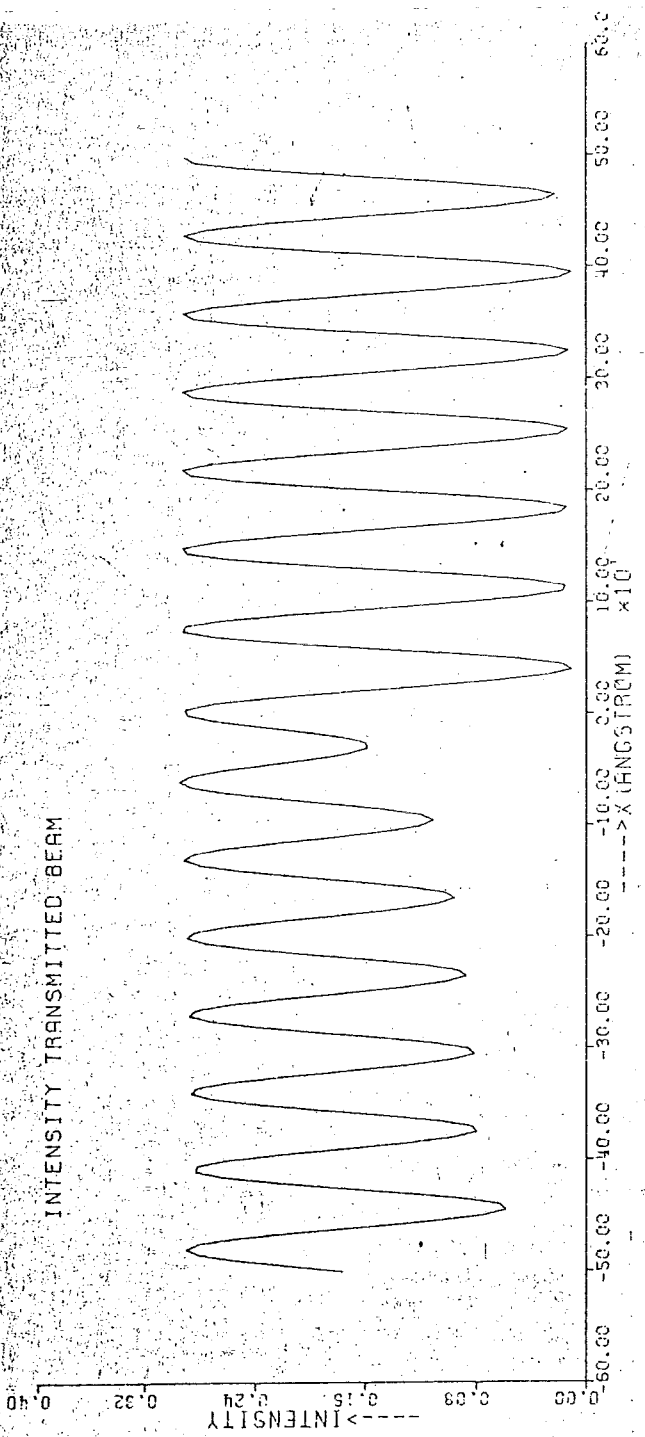


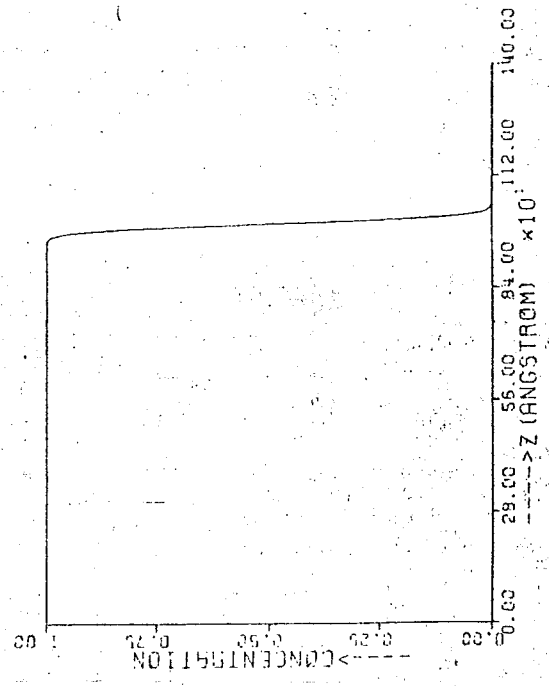
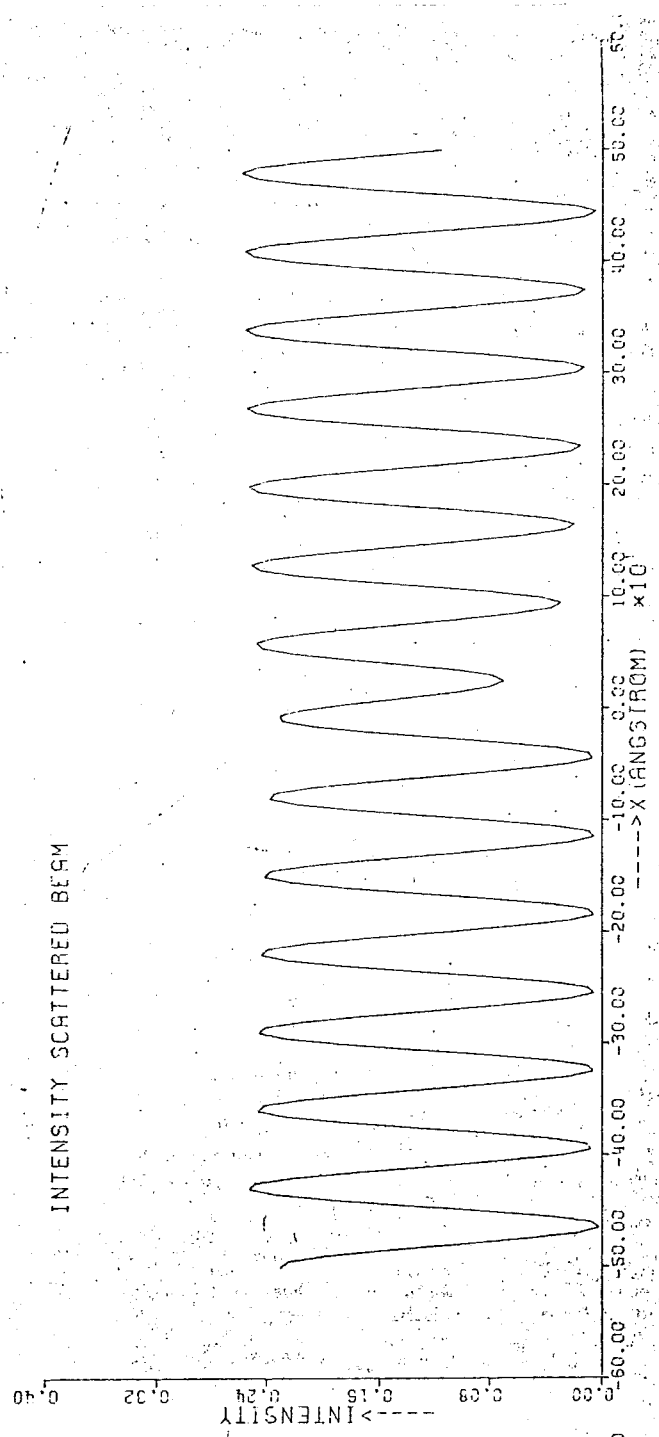
Fig. 5a

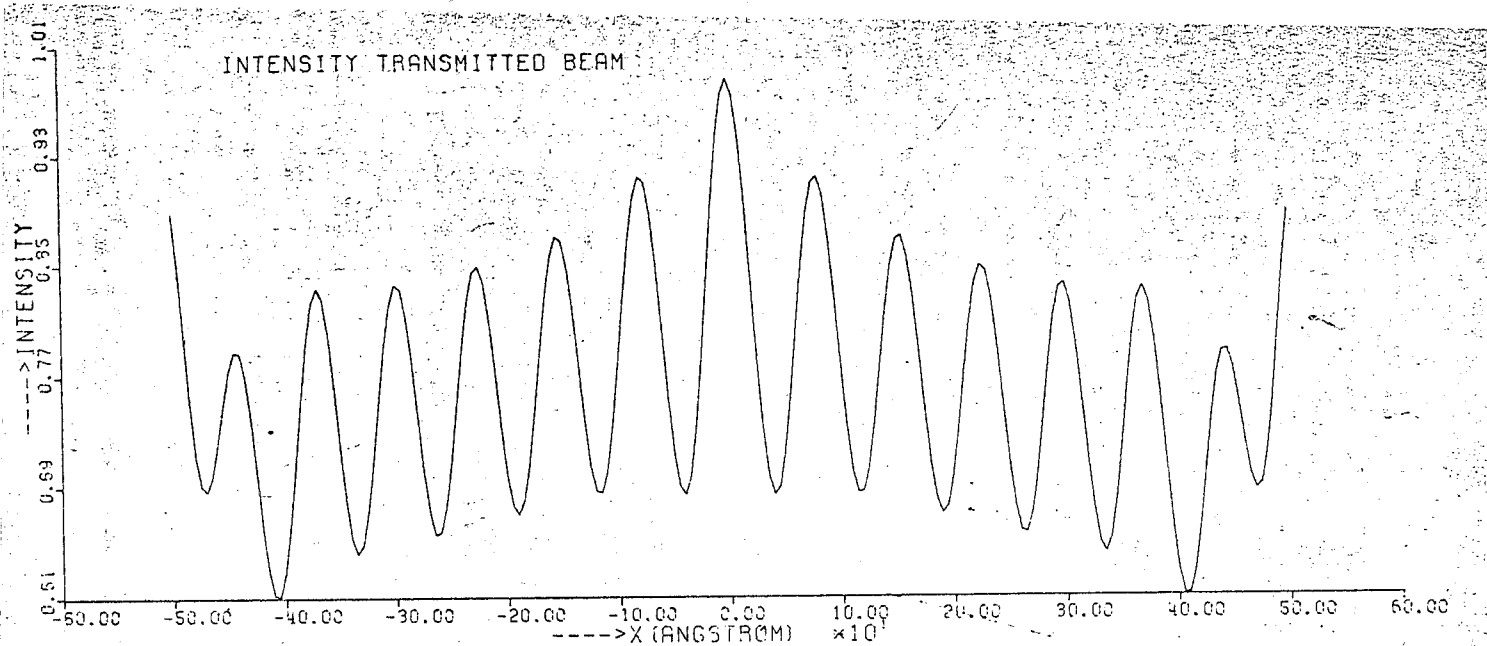
$t = 0.5 h$

INTENSITY TRANSMITTED BEAM

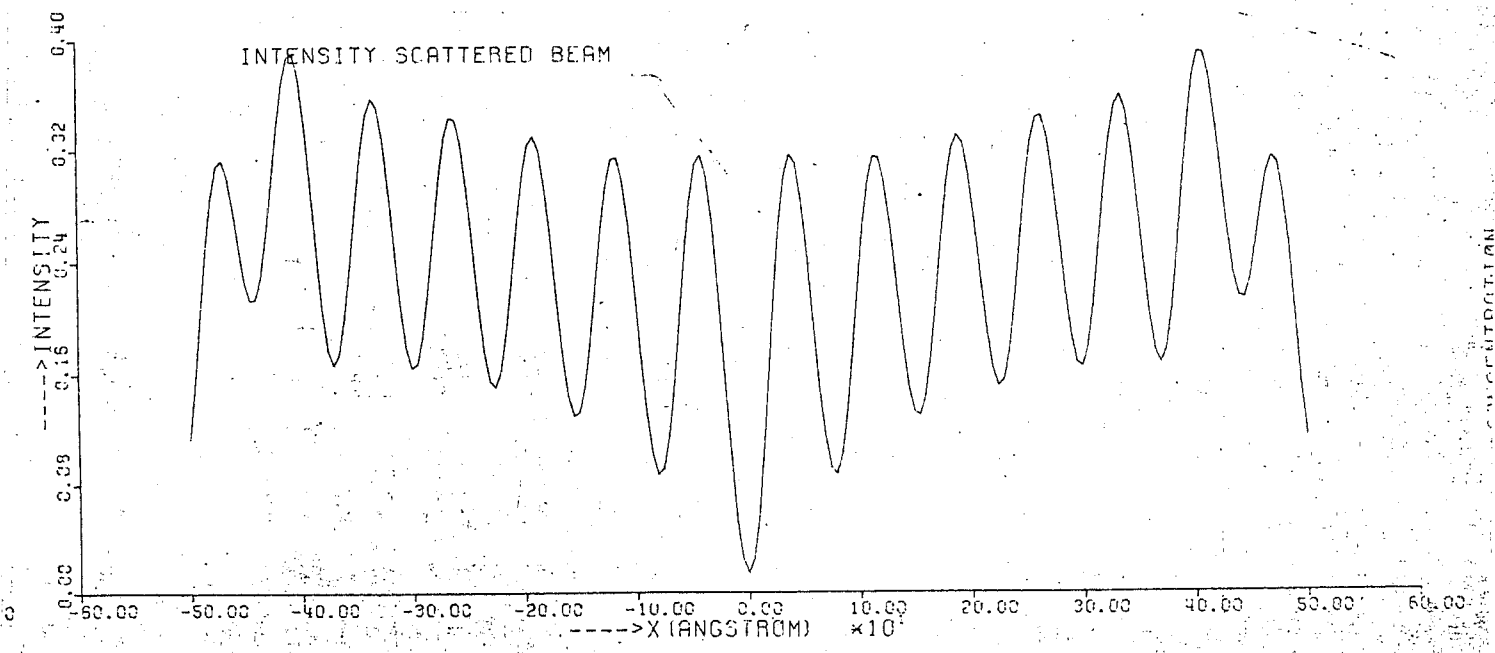


INTENSITY SCATTERED BEAM



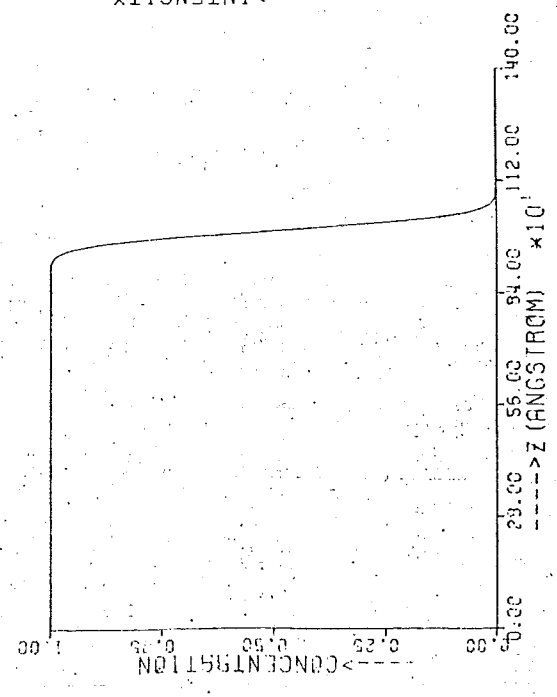
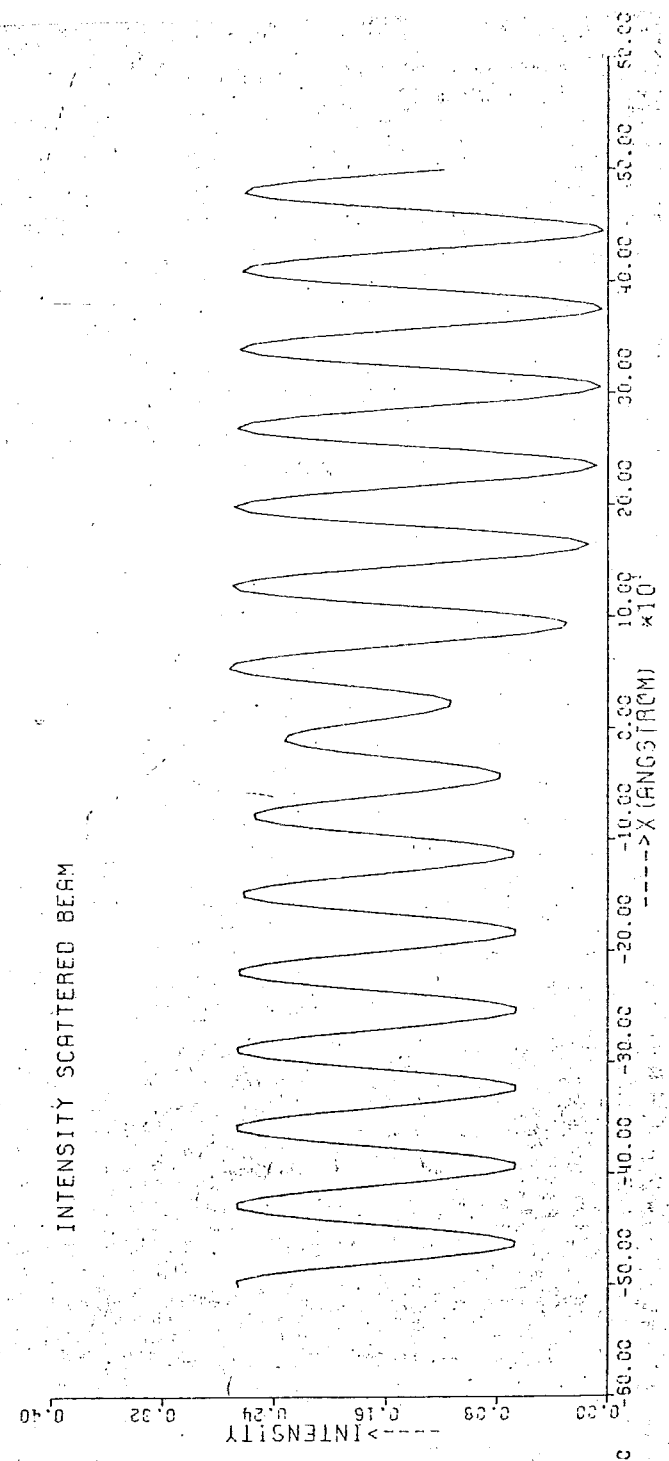
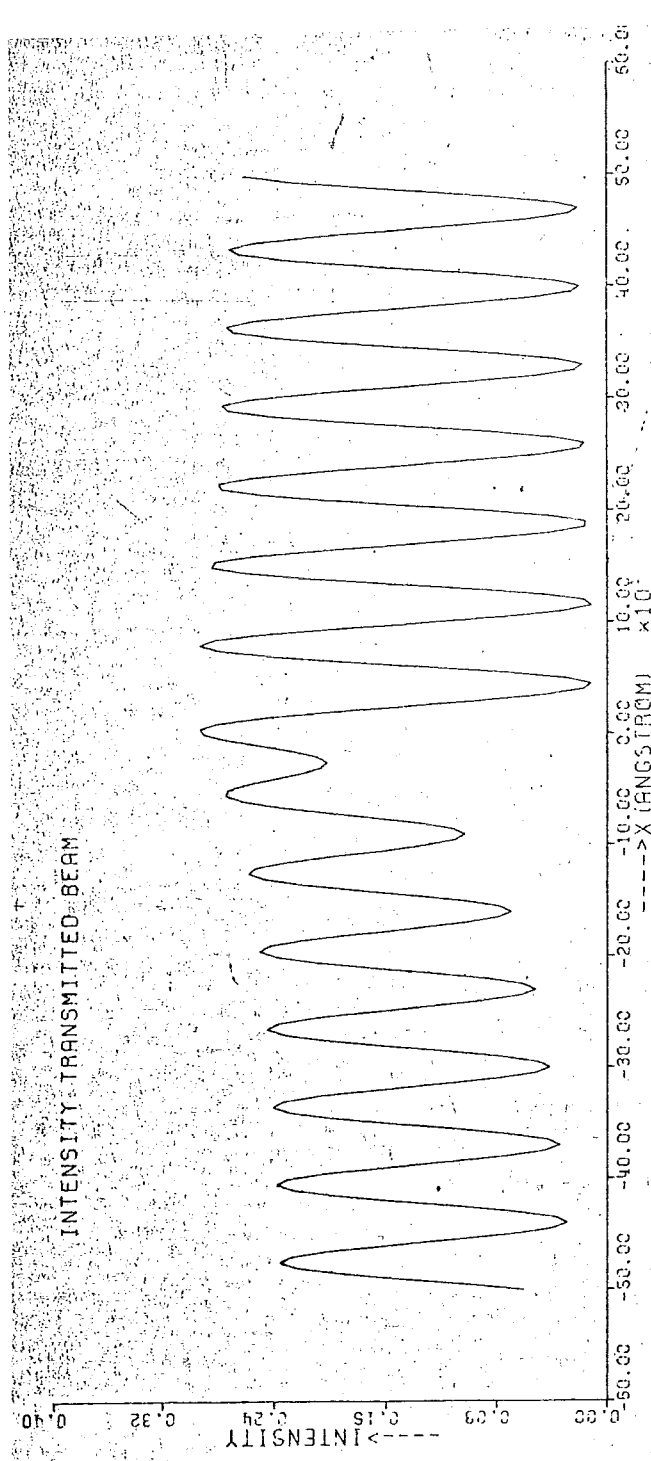


*vervolg
Fig. 5a*



CONSTRUCTION

Fig. 5 b
 $t = 2 \text{ h}$



very
Fig. 5.6

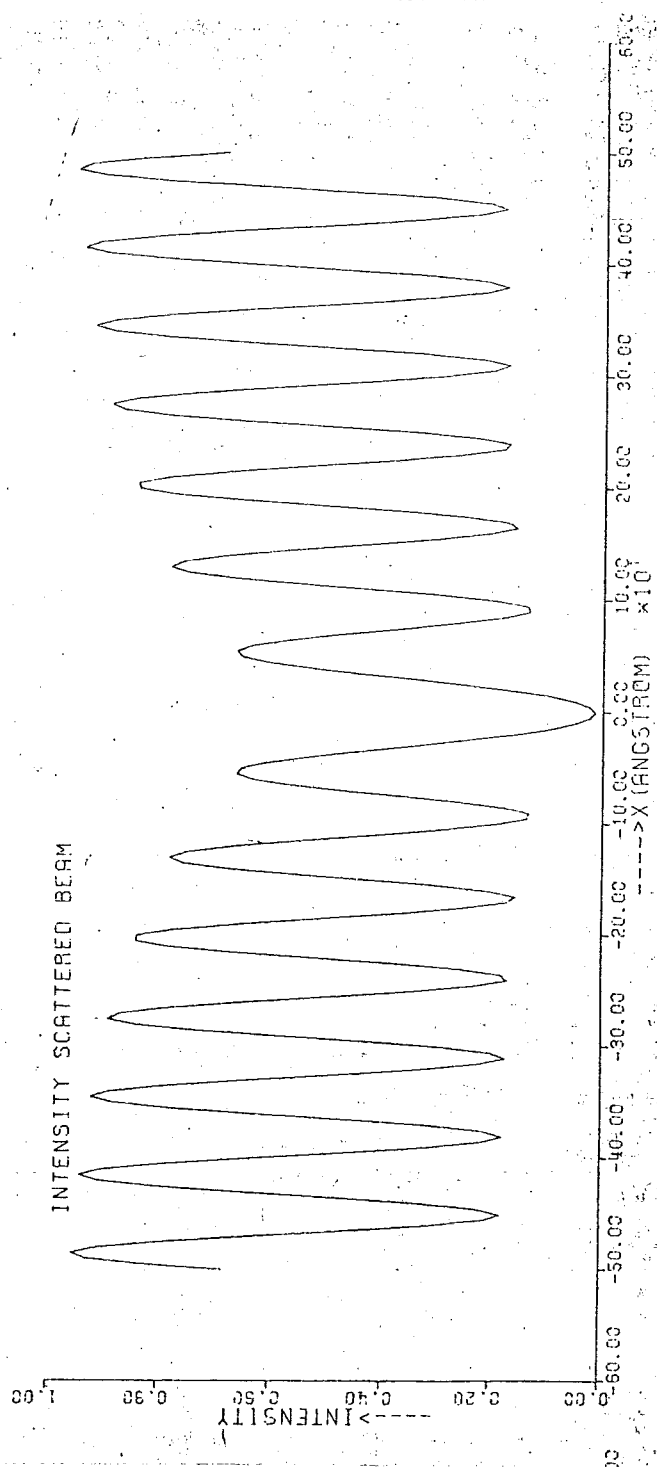
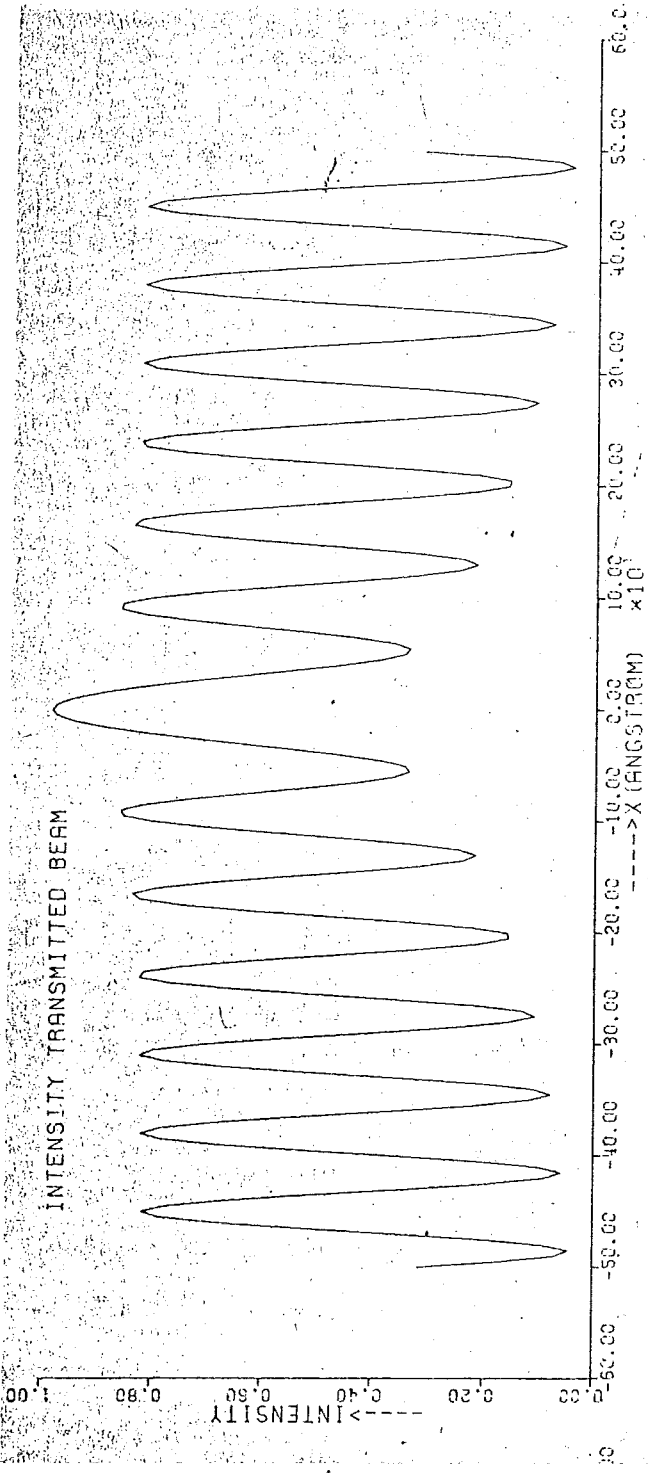
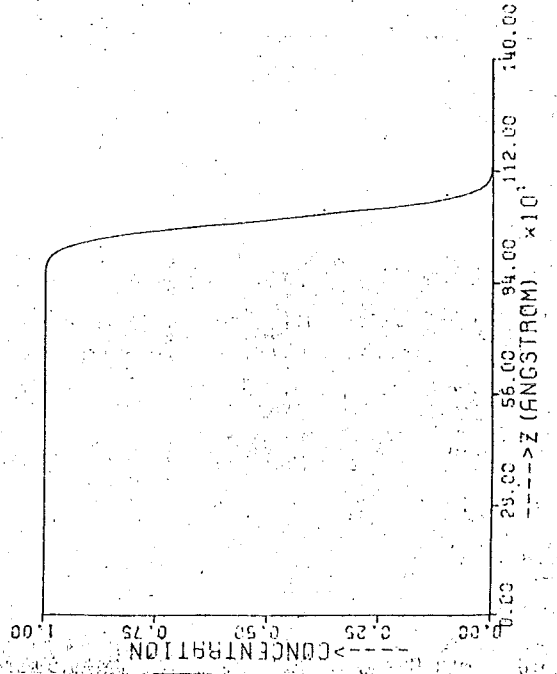
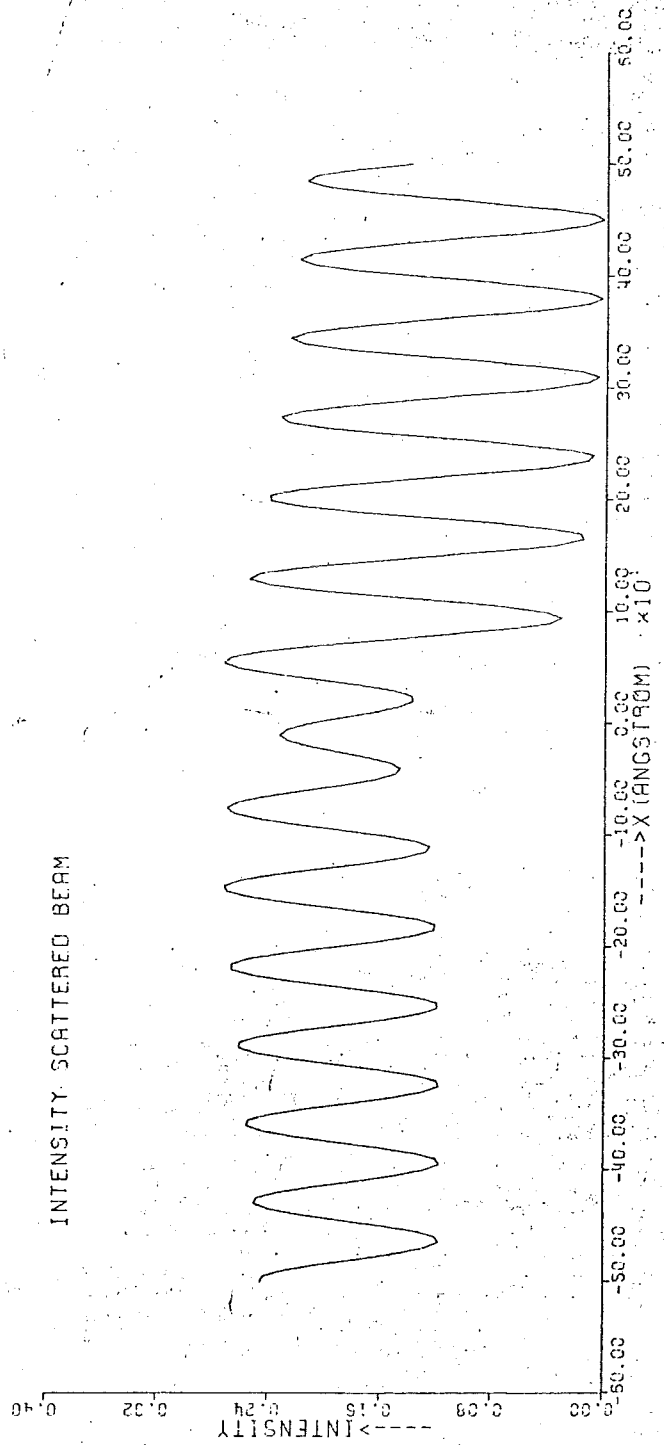
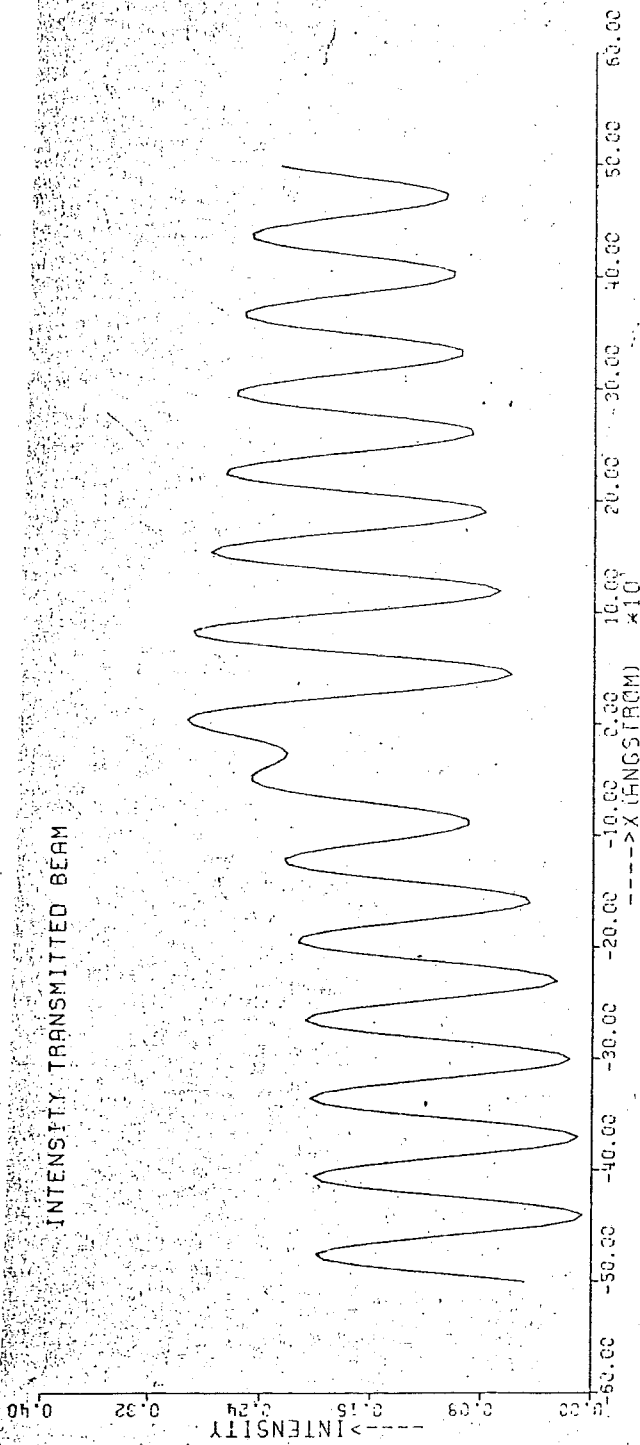
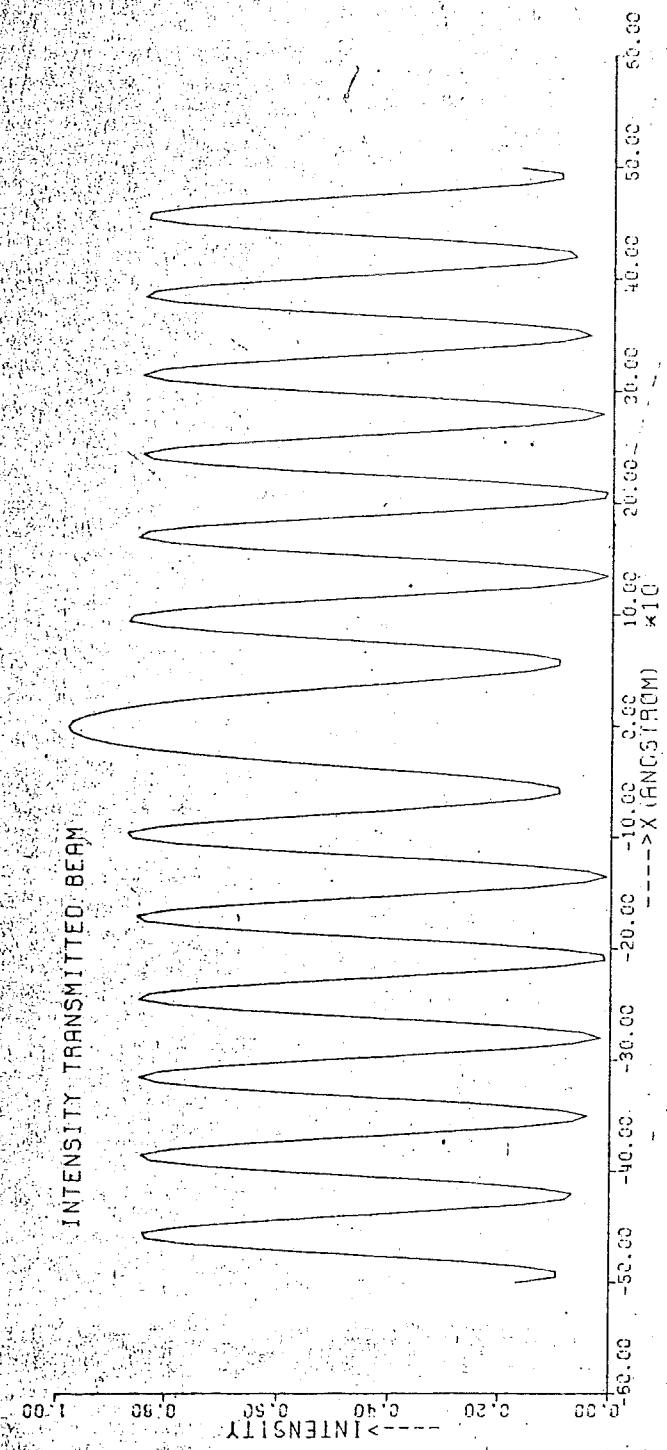


Fig. 5c
 $t = 4h$



very
fig. 5c

INTENSITY TRANSMITTED BEAM



INTENSITY SCATTERED BEAM

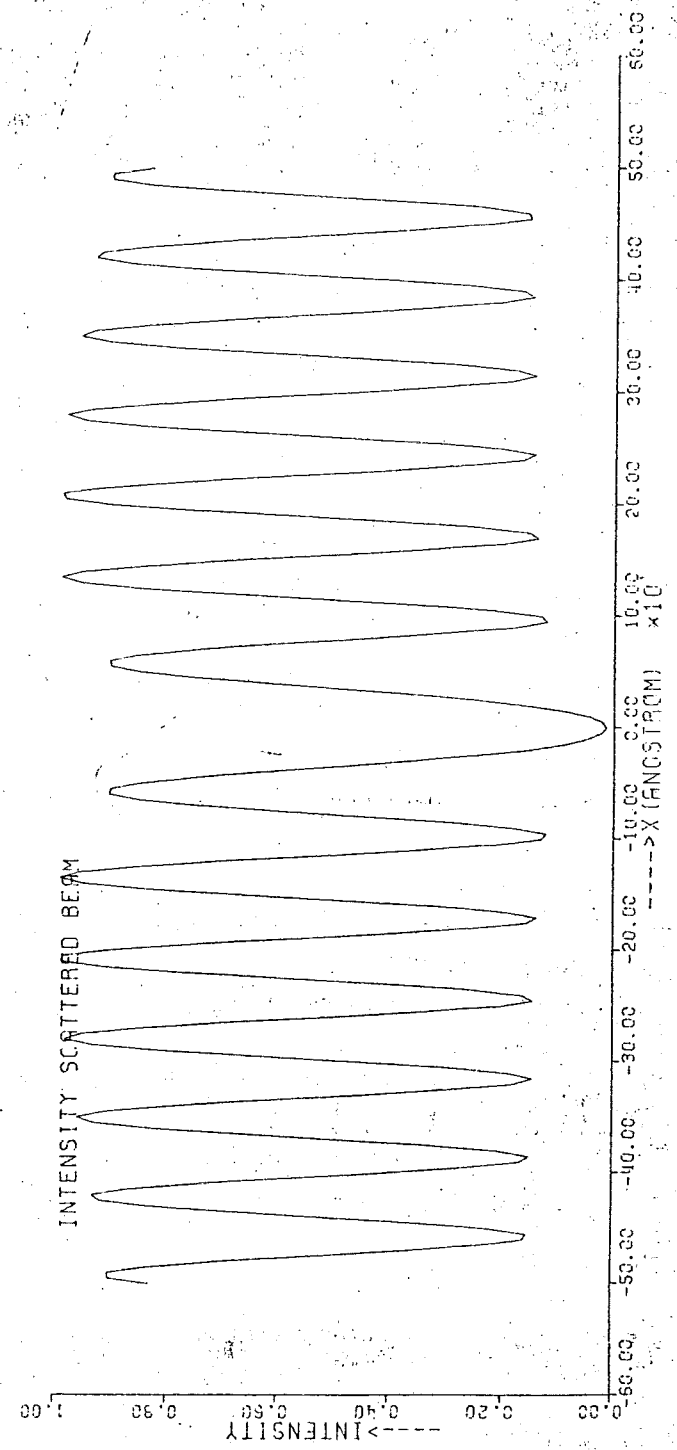
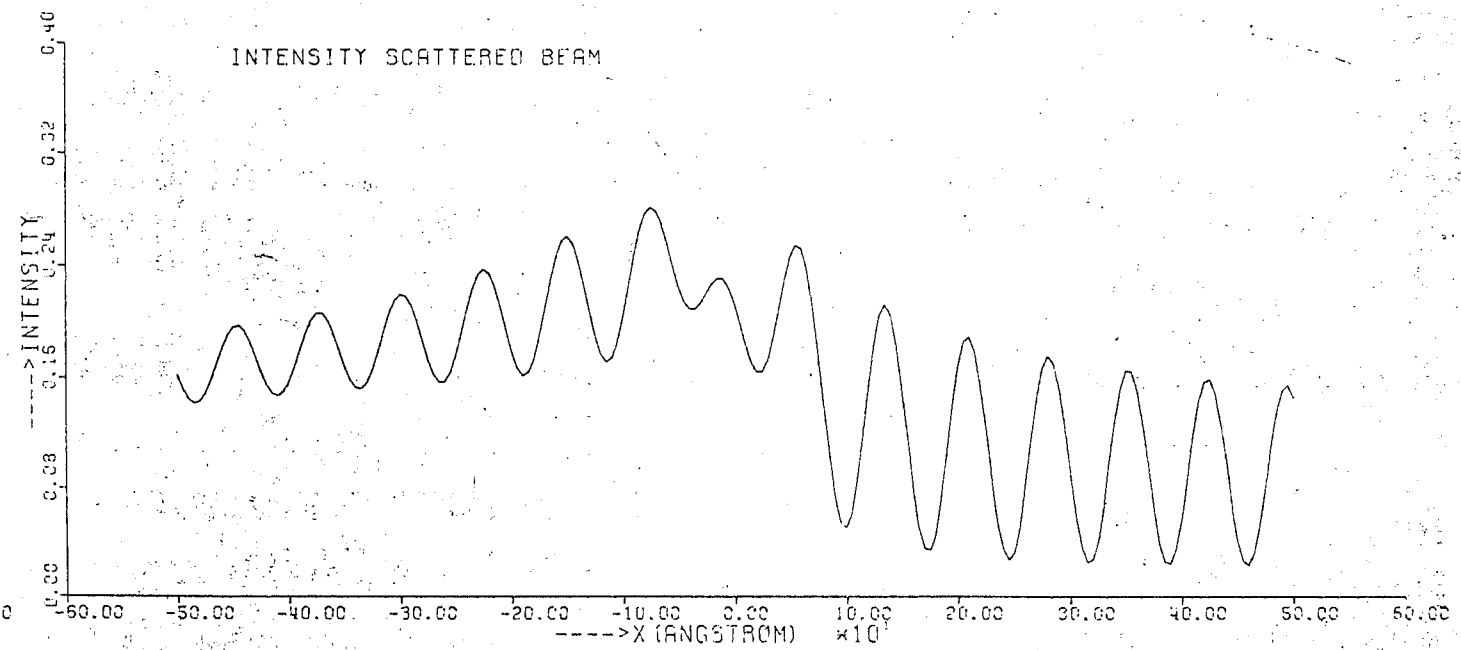
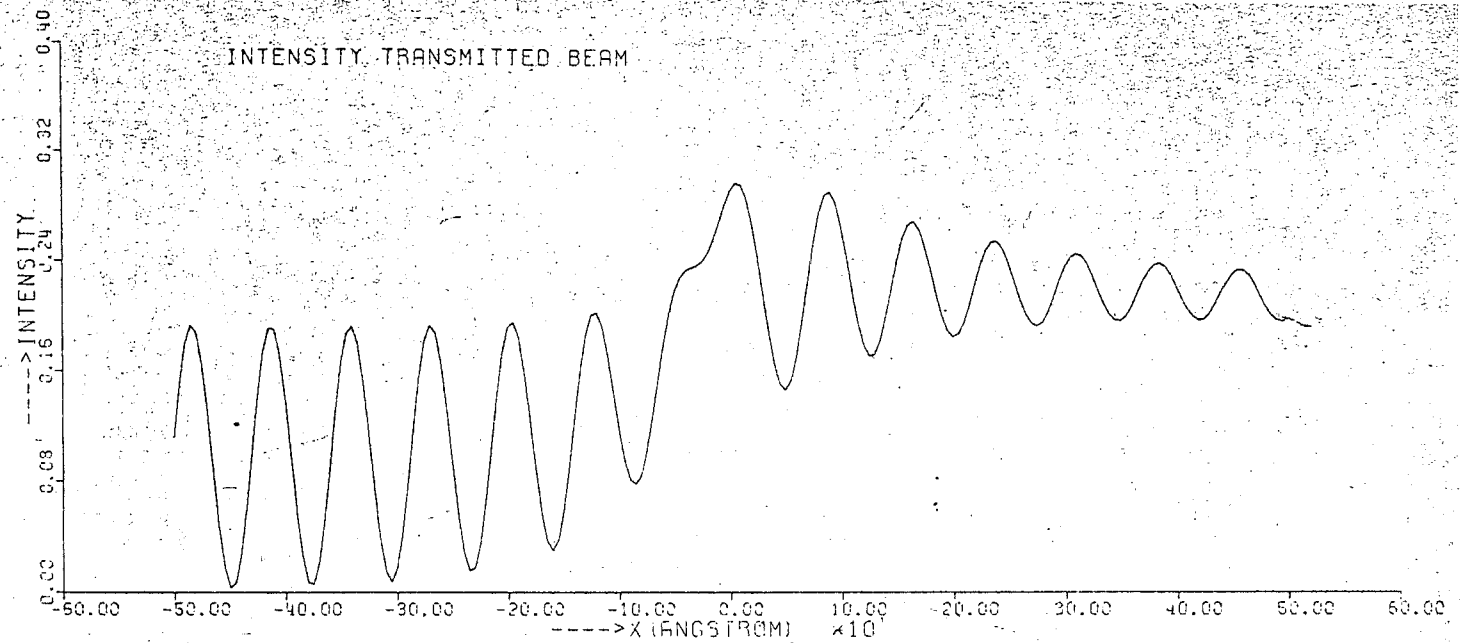
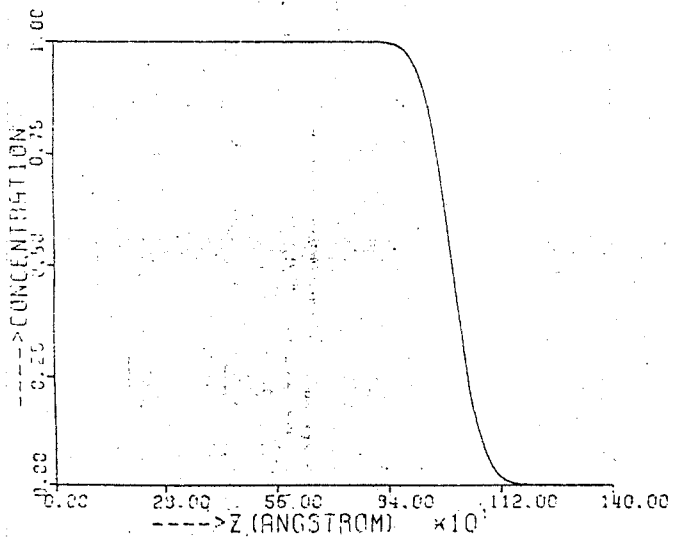
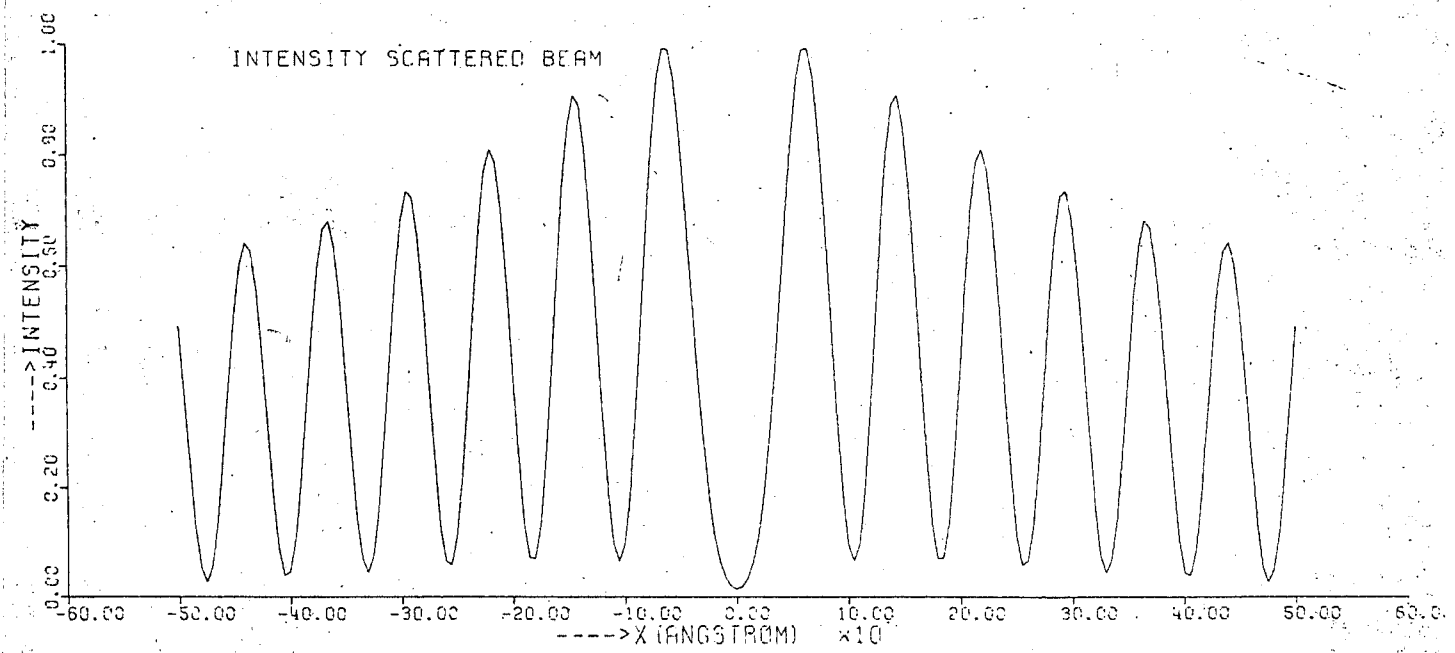
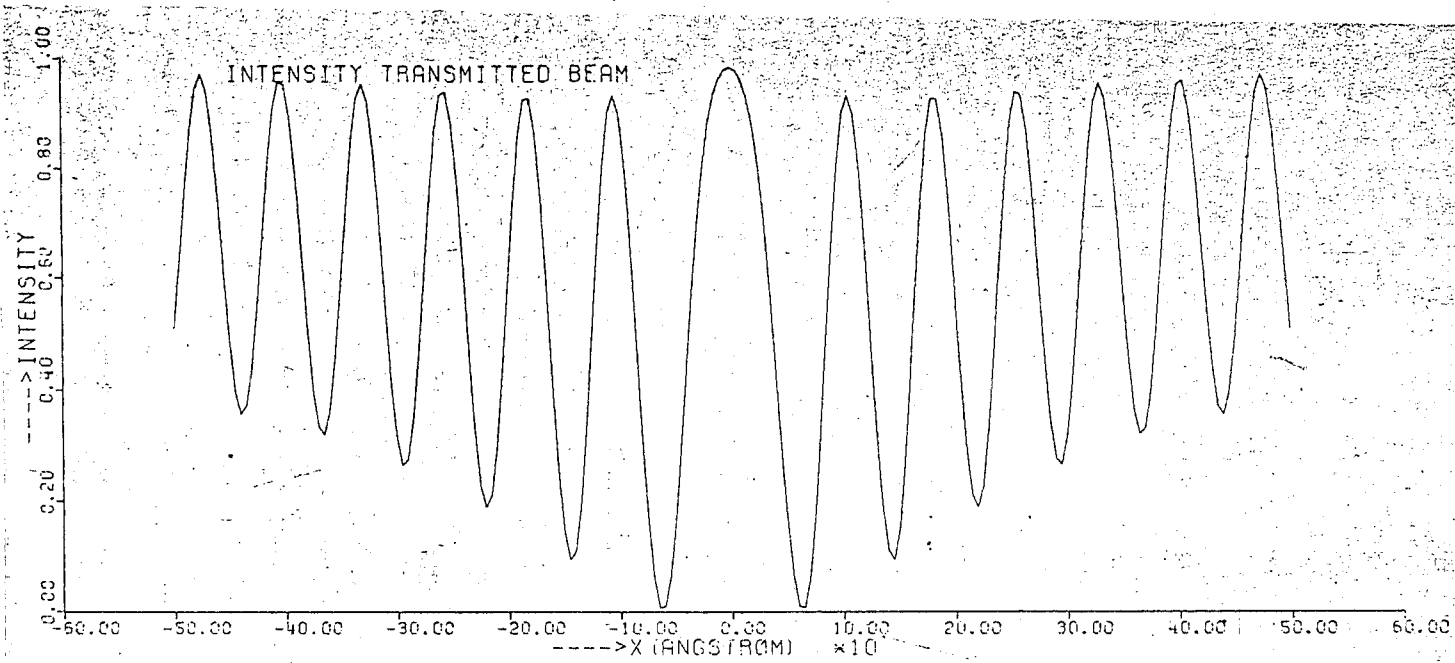


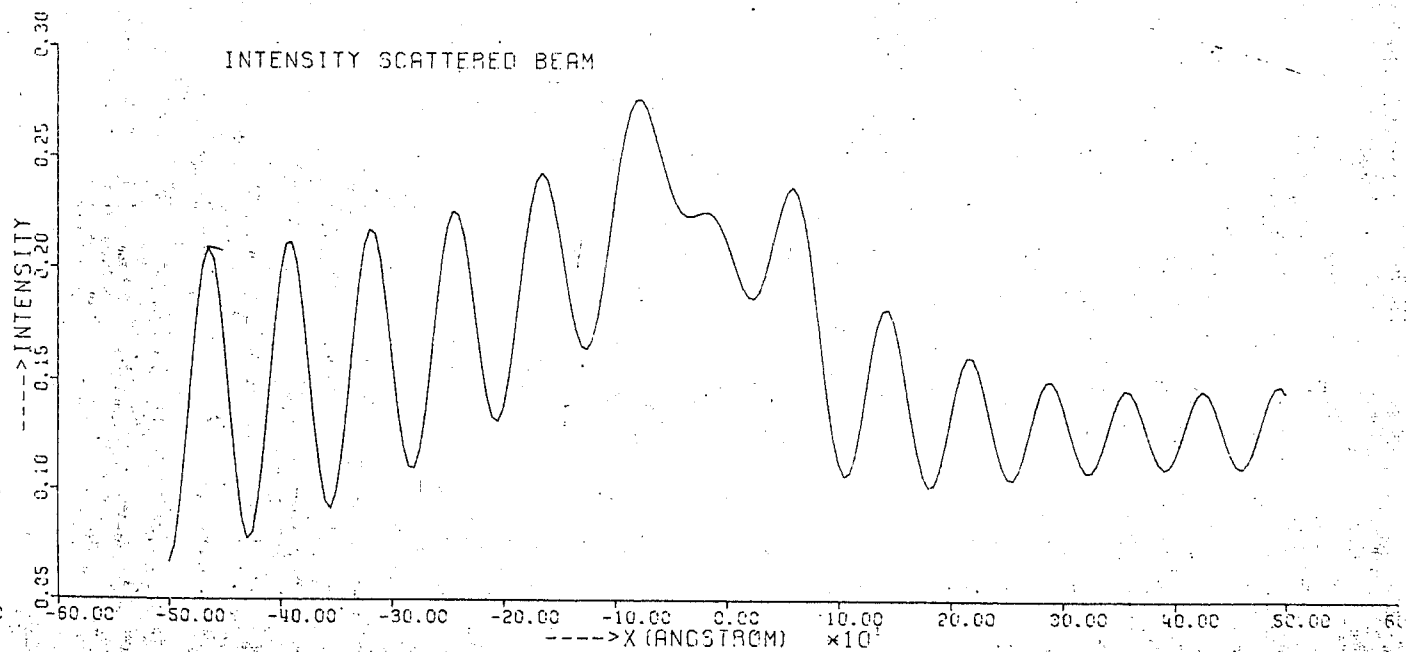
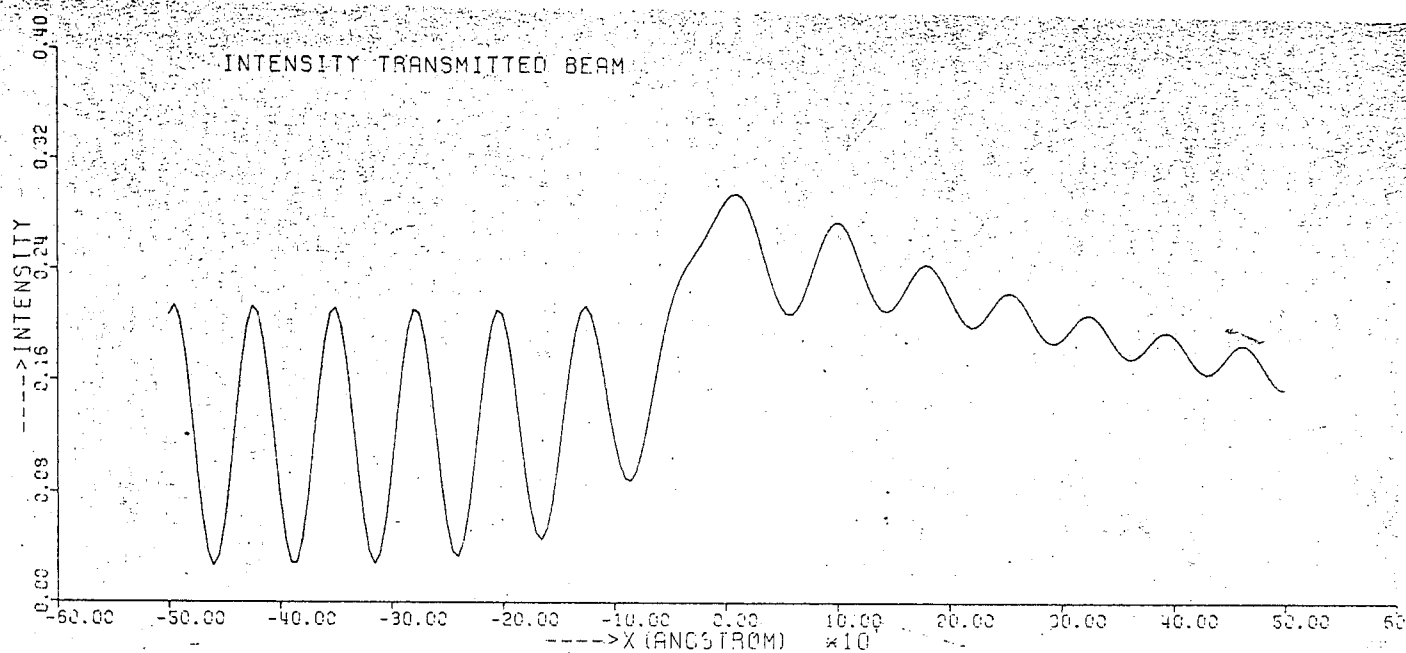
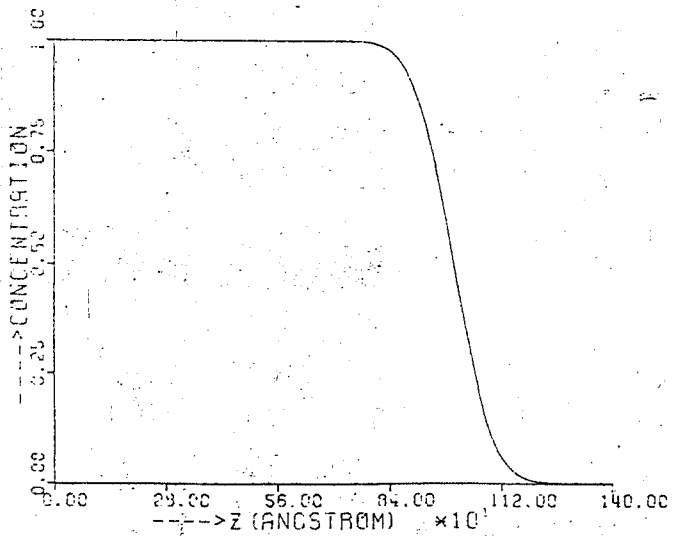
Fig. 5d
 $t = 8h$



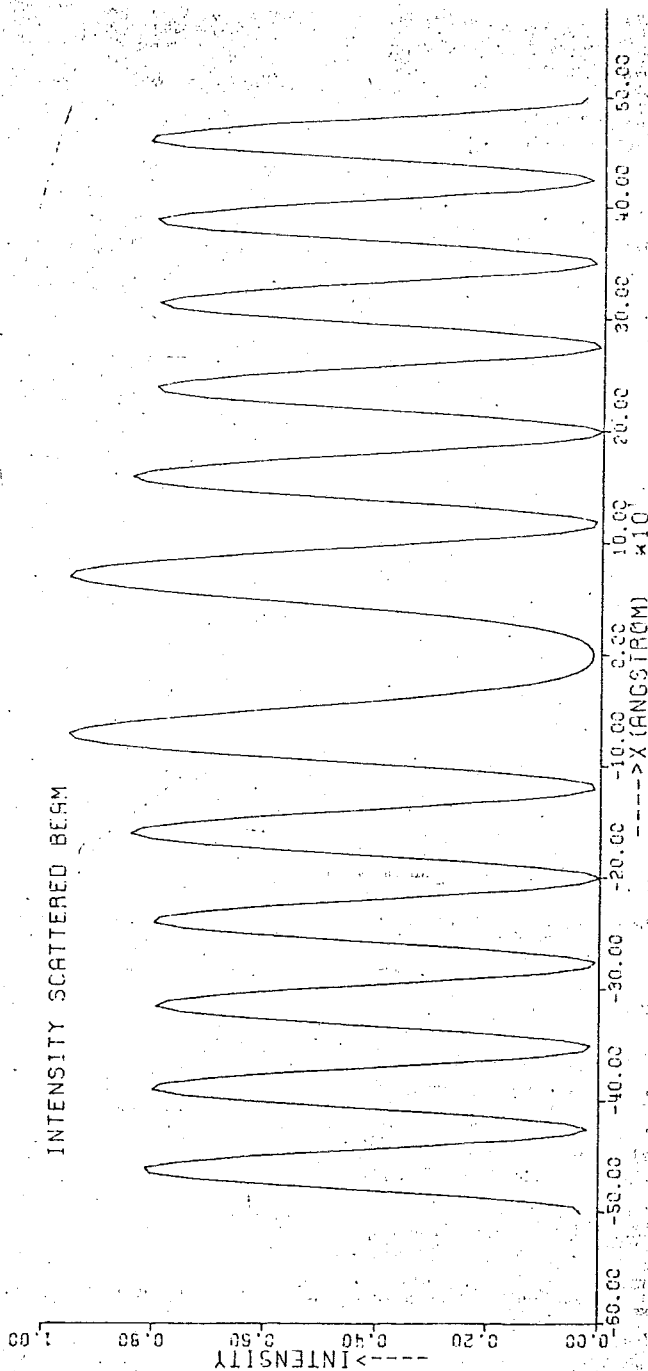
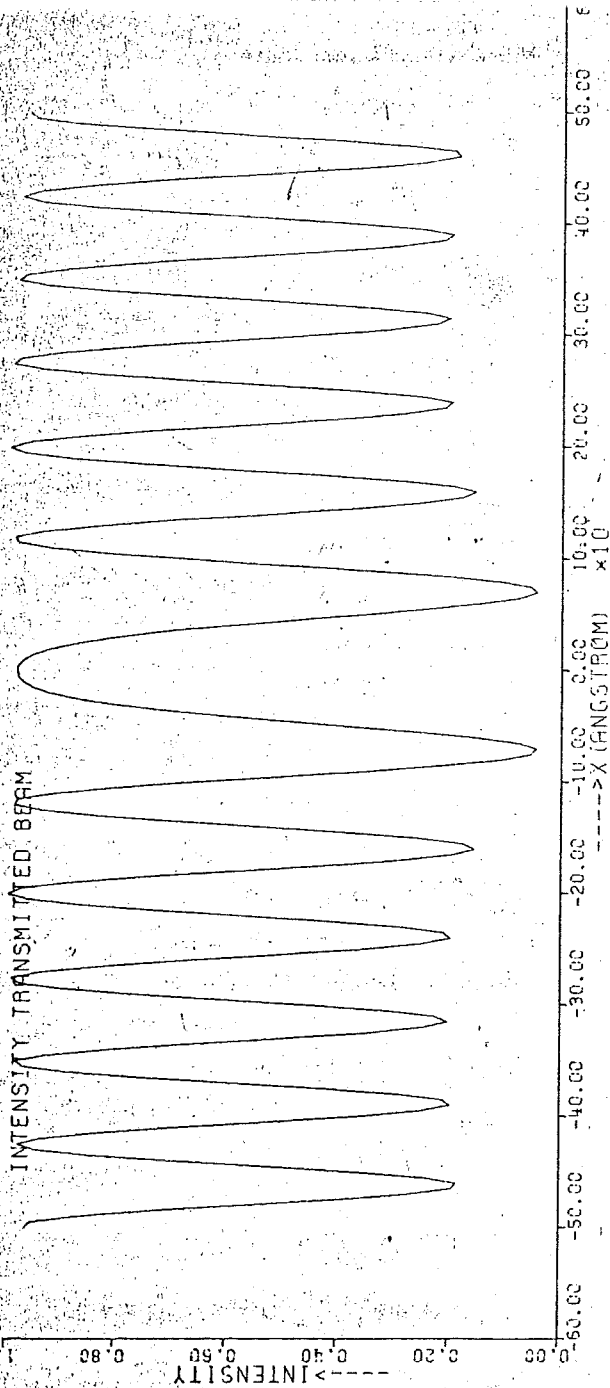


vervolg
Fig. 5d

Fig. 5e
 $t = 15h$



veroooy
Fig. 5e



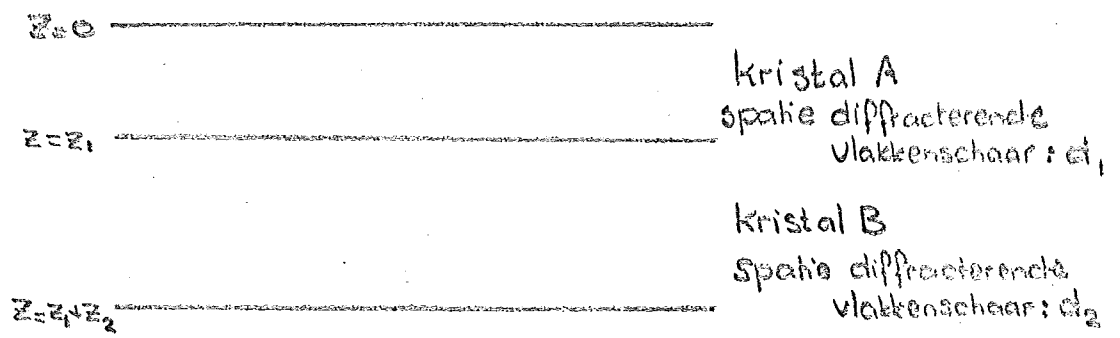


Fig 6a A/B koppel vóór diffusie

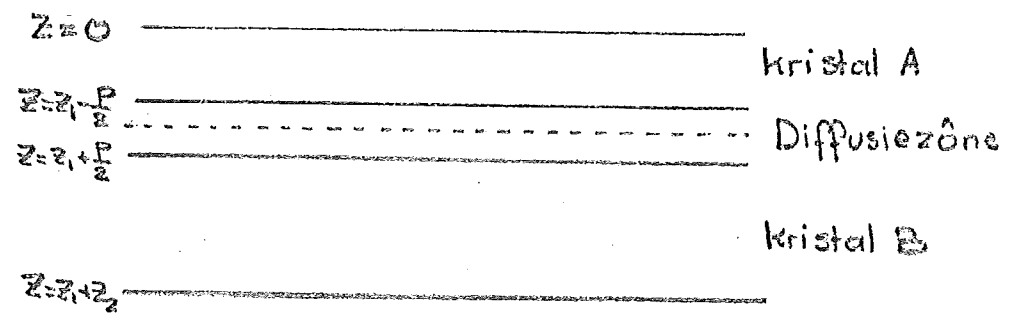


Fig 6b A/B koppel na diffusie

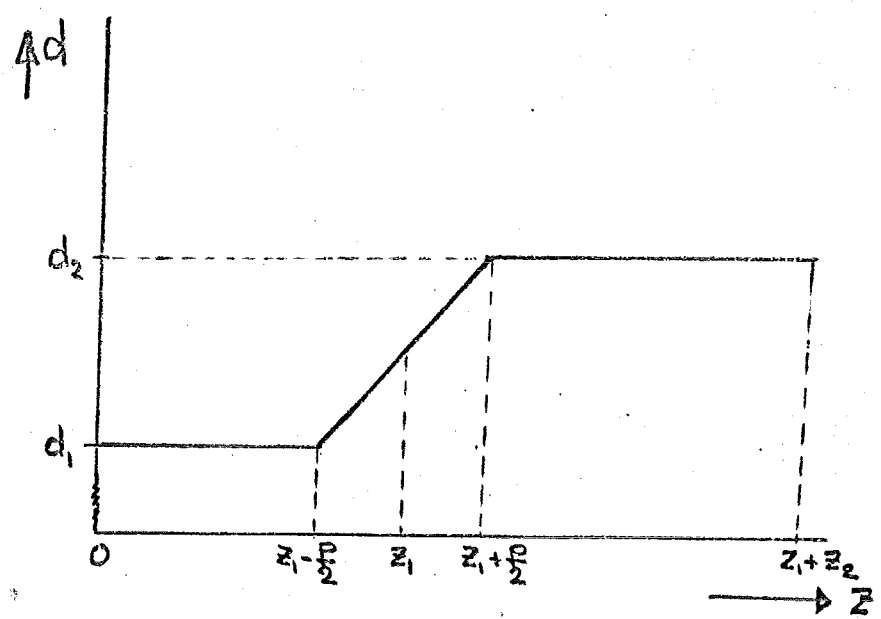


Fig. 7 Roosterconstanteprofiel na diffusie

IV BESCHRIJVING VAN DE EXPERIMENTEN

IV-1 Inleiding

Voor transmissie-electronenmicroscopisch onderzoek is het noodzakelijk te beschikken over preparaten, die dun genoeg zijn om door de electronenbundel te kunnen worden doorstraald. Voor metalen geldt algemeen, dat de preparaten dikker kunnen zijn naarmate het atoomnummer kleiner is; bovendien hangt de toepasbare dikte nog af van de versnellingsspanning van de electronen, de grootte van het objectiefdiafragma en de oriëntatie van het kristal. Voor koper en nikkelpreparaten betekent dit dat de bovengrens voor de dikte ongeveer 3000 Å is.

Voorts is het gunstig als het preparaat zo evenwijdig mogelijke begrenzingen heeft, het oppervlak ervan geen in- en uitstulpingen bevat, en vooral ook, dat dit oppervlak schoon is en blijft.

*rational
def!*

Voor het verkrijgen van dunne preparaten kunnen verschillende methoden worden toegepast, waarvan op dit moment (electro)chemisch polijsten en opdampen in vacuüm de belangrijkste zijn, hoewel ook andere technieken worden toegepast.

In het hier beschreven onderzoek werden de preparaten bereid door op een electrolytisch gepolijst preparaat, doorstraalbaar voor de electronenbundel, epitactisch met behulp van vacuümdepositie een dun laagje (± 400 Å) koper neer te slaan.

IV-2 Het Electropolijsten van Nikkel

Ho

Van een staaf spectraal zuiver polykristallijn nikkel (fabrikant, Johnson, Matthey and Co, Ltd) werden stukjes afgezaagd; deze werden gewalst tot strips met een dikte van 0,3 mm, waaruit preparaatjes met een doorsnede van 3 mm werden geponst. Nadat de preparaatjes licht waren geschuurd met fijn schuurpapier, werden ze onder vacuüm ($\pm 10^{-5}$ torr) gedurende 24 uur spanningvrij gegloeid; hierna waren de nikkelpreparaatjes gereed voor een electropolijstprocedure, teneinde ze te voorzien van een dun (doorstraalbaar) gebied.

*instructie
poo^oe*

Het electropolijsten geschiedde in de Tenupol (fabrikant Struers) bij een temperatuur van -70°C en een stroomdichtheid van 30 mA/mm^2 in een electrolyt, bestaande uit 6% perchloorzuur in methanol. Na het polijsten werden de preparaten gespoeld in methanol, om op het preparaat geadsorbeerde electrolyt te verwijderen. Andere baden, waaronder het door Struers aanbevolen A-8 bad bleken niet te voldoen aan de door ons aan het preparaat gestelde eisen: een zo groot mogelijk dun gebied en geen zichtbare etseffecten, zelfs niet bij maximale vergroting in de electronenmicroscop. Met de door ons gebruikte methode voldeden de preparaten in vrijwel alle gevallen aan de gestelde eisen. Na het electropolijsten hebben de preparaten dan de vorm als geschetst in fig. 1. Dank zij de grote betrouwbaarheid van de polijstprocedure behoeften de preparaten geen controle meer in de electronenmicroscop (met kans op koolvorming op het oppervlak) en konden zij direct na bereiding van een dun epitactisch koperlaagje worden voorzien.

IV-3 Het Epitactisch Opdampen van Koper

Opmerking: De in deze paragraaf beschreven experimenten en het ontwerpen en construeren van voor ons doel geschikte onderdelen voor de opdampinstallatie werden uitgevoerd in samenwerking met de heer Weerheijm.

De opstelling hiervoor is schematisch weergegeven in fig. 2. Het gehele systeem is opgesteld onder een klok, waarin tijdens het opdampen een vacuüm van $(1-2) \times 10^{-5}$ torr heerst.

K Het oventje, vervaardigd uit wolframdraad, gekit met gesinterd aluminiumoxide, waaruit spectraalzuiver koper (fabrikant Johnson, Matthey and Co, Ltd) wordt verdampt, bevindt zich op 27 cm van het preparaat. Het preparaat wordt met klemmetjes gemonteerd op een plaatje, dat de bodem vormt van een ander oventje ; doel hiervan is de substraattemperatuur, zodanig te kunnen instellen, dat de mobiliteit van de koperadatomen groot genoeg is om energetisch gunstige posities in te kunnen nemen, hetgeen voor epitactische groei onontbeerlijk is.

Op dezelfde hoogte als het substraat is een kwartskristal gemonteerd, met behulp waarvan de dikte van het koperlaagje kan worden gemeten.

enit dit ook?
1250°C (200
f. puf)
shijel met
10 (2)

Dit kwartskristal maakt deel uit van de Deposition Control Master Omni II (fabrikant Sloan). Van dit apparaat dat is bedoeld om het gehele opdamproces automatisch te starten, regelen en stoppen, werd alleen de mogelijkheid tot laagdiktemeting gebruikt. Het benutten van de andere mogelijkheden, zou wellicht zinvol zijn geweest, maar kon niet eenvoudig gerealiseerd worden, omdat het apparaat op processen van groter schaal gedimensioneerd is.

De temperaturen van verdampings- en substraatoven werden als functie van de stroomsterkte door de gloeidraad bepaald met respectievelijk een pyrometer en een thermokoppel; grote nauwkeurigheid kon hiermee niet worden bereikt, bovendien was de verdampingsoven nogal aan slijtage onderhevig, waardoor steeds grotere stroomsterkten nodig worden om, in verband met toegenomen warmteverliezen, een bepaalde temperatuur te behalen.

De omstandigheden waaronder goede epitaxie optreedt en een continue opgedampte laag wordt gevormd zijn afhankelijk van de substraattemperatuur (te regelen met de substraatoven) en de opdamsnelheid (te regelen met de verdampingsoven).

Uit inleidende experimenten bleek, dat bij lage substraattemperatuur, bijvoorbeeld kamertemperatuur, van epitaxie geen sprake was en dat bij te lage of te hoge opdamsnelheden geen continue film van constante dikte werd gevormd, maar eilandjes ontstonden op een onbedekt substraat (te lage opdamsnelheid) of op een continue film (te hoge opdamsnelheid).

Het best bleek een substraattemperatuur van 250°C en een opdamsnelheid van ca. $40 \text{ \AA}/\text{minuut}$ te voldoen. De dikte van de opgedampte laag bedroeg steeds 435 \AA . Hierbij kan opgemerkt worden dat de absolute nauwkeurigheid waarmee deze dikte bekend is misschien niet zo hoog is. De relatieve nauwkeurigheid is echter zeer goed. De reproduceerbaarheid van de dikte van de opgedampte laag is beter dan 1%.

IV-4 Alternatieve Prepareermethoden voor Doorstraalbare Epitactische Bikristallen

De meest toegepaste methode om doorstraalbare epitactische bikristallen te bereiden is het successievelijk opdammen van de beide componenten op bijvoorbeeld het (100) vlak van een NaCl-kristal, dat vervolgens in water wordt opgelost.

*11 gemeten
nauwkeurig?
v. y. h.
de bekend?*

Hierover is reeds zeer veel literatuur verschenen. [1, 2, 3, 4] is slechts een bescheiden greep uit een grote rijkdom. Een andere methode bestaat uit de elektrokrystallisatie van de ene component op een opgedampt substraat van de andere [5, 6].

Voordeel van vooral de eerstgenoemde methode is, dat onder gunstige condities continue films van goed gedefinieerde dikte met een bepaalde oriëntatie kunnen worden verkregen; nadeel is vaak de geringe mechanische sterkte van de films en de aanwezigheid van veel roosterfouten (hoge dislocatiedichtheden).

In de loop van het onderzoek hebben wij getracht, mede gezien de successen van Mittemeijer en Smid [7, 8, 9] met de epitactische elektrokrystallisatie van koper op éénkrystallijn nikkel, onze preparaten te bereiden door elektrokrystallisatie van koper op onze (polykrystallijne) nikkelpreparaten, nadat deze door electropolijsten van een dun gebied waren voorzien.

Hoewel deze methode incidenteel succes had, bleek de reproduceerbaarheid van de methode niet van dien aard, dat het zinvol werd geacht dit soort experimenten voort te zetten. Als er al koper aanwezig was op het substraat, bleek deze in alle onderzochte gevallen geen continue laag te vormen, maar veeleer uit een verzameling her en der verspreide kleine kristallieten (breedte in de orde van 0,1 μm) te bestaan, die zich overigens wel epitactisch op het substraat bevonden. In andere gevallen had het koper zich in de vorm van kleine dikke kristallieten preferent op de korrelgrenzen van het substraat afgezet.

De elektrokrystallisatie werd overigens niet diepgaand onderzocht, aangezien bleek, dat met opdampen meer succes was te behalen (zie IV-3).

IV-5 Het Waarnemen van de Preparaten in de Electronenmicroscop

Nadat de doorstraalbare preparaten van een opgedampt koperlaagje waren voorzien, waren ze geschikt om er diffusie-onderzoek aan te verrichten.

Ze werden hiertoe in de verhittingshouder van de electronenmicroscop gebracht. De verhittingshouder bevat een oventje en een thermokoppel en is verbonden met een "Temperature Control Unit" (fabrikant Philips), waarmee de temperatuur tot op enkele graden nauwkeurig kan worden ingesteld en afgelezen.

De preparaten werden bekeken in de electronenmicroscop (Philips EM 300), in praktisch alle gevallen bij maximale vergroting in de "selected area" stand (vergroting 126.000 x). Alle waarnemingen werden gedaan zonder kanteling van het preparaat (0° "tilt"). Kantelen van het preparaat had soms grote voordelen kunnen hebben, omdat daardoor bepaalde diffracterende vlakken beter in diffractiestand hadden kunnen worden gebracht, maar bracht grote experimentele moeilijkheden met zich mee.

Deze experimentele moeilijkheden waren voornamelijk te wijten aan de vorm en samenstelling van het preparaat: om het relatief kleine dunne gebied bevond zich namelijk steeds een dikke rand van nikkel, dat, zoals bekend, ferromagnetisch is, waardoor een sterke interactie met de electronenbundel ontstaat [10, 11].

De afwezigheid bovendien van Kikuchilijnen in het diffractiepatroon, waarmee de oriëntatie van het folie ten opzichte van de bundel en vooral ook de belangrijke deviatieparameter s voor een bepaalde reflectie kan worden bepaald [12], kan zeker aan de natuurlijk altijd aanwezige imperfecties in de opgedampte laag, maar mogelijk voor een deel aan de magnetische eigenschappen van het substraat geweten worden.

Van alle onderzochte preparaten werden moiré-patronen voor diffusie in helderveld en donkerveld vastgelegd tezamen met het bijbehorende diffractiepatroon. Bij voorkeur werden hierbij lage indices moiré-patronen bekeken (bijvoorbeeld (200) en (220) aangezien deze de grootste spatie hebben. Kubische diffractiepatronen werden vooral voor verhitten dikwijls waargenomen (bij 0° tilt), waarschijnlijk een gevolg van het walsen (zie IV-2).

Na verhitten ($450-550^\circ\text{C}$) werden de preparaten aanvankelijk beter door het verdwijnen van imperfecties in de opgedampte laag, hetgeen goed te zien was aan het regelmatig worden van de moiré-patronen.

Na tamelijk lange verhittingstijden, afhankelijk van de temperatuur, werden de preparaten allengs slechter tot zeer slecht; er vielen gaten in het dunne gebied en er trad kool- en oxidevorming op. Goede diffractiestanden werden schaars en de diffractiepatronen werden zeer gecompliceerd. Al deze verschijnselen, die overigens verwacht konden worden, zijn niet nader bestudeerd.

zie ook prof.
hoe lang? ↓
compatibel?
niet te schakelen

Bij toepassing van niet te lange verhittingstijden (bv. bij 500°C ; $< \pm 15$ h) konden de moiré-patronen in helderveld en donkerveld en de bijbehorende diffractiepatronen echter zeer goed op de gevoelige plaat worden vastgelegd.

Tijdens de waarnemingen werden speciale voorzorgen genomen om een zo nauwkeurig mogelijk beeld van de moiré-patronen te verkrijgen. Opvallend hierbij was, dat de moiré-patronen niet maximaal scherp waren, als de rest van het "beeld" scherp was. Het bleek, dat het objectief iets moest worden overgefocusseerd; dit is in overeenstemming met de bevindingen van andere onderzoekers [13].

is functioneel

Literatuur

- [1] Matthews, J.W.
Phil. Mag. 6, 1347 (1961)
- [2] Pashley, D.W.
Adv. in Phys., 327, (1965)
- [3] Shinohara, K. & Hirth, J.P.
Thin Solid Films, 16, 345 (1973)
- [4] Chambers, A. & Jackson, D.C.
Phil. Mag. 31, 1357 (1975)
- [5] Ives, A.G., Edington, J.W. & Rothwell, G.P.
Electrochemica Acta. 15, 1797 (1970)
- [6] Gaigher, H.L. & Van Wijk, G.N.
Thin Solid Films 15, 163 (1973)
- [7] Mittemeijer, E.J.
Afstudeerverslag, Delft (1972)
- [8] Smid, W.
Intern rapport, maart 1974
- [9] Delhez, R., Mittemeijer, E.J. & Smid, W.
Acta Cryst., A 31, Part S 3, S 212 (1975)
- [10] Jakubovics, J.P.
Phil. Mag. 10, 277 (1964)
- [11] Jakubovics, J.P.
Phil. Mag. 13, 85 (1966)
- [12] Head, A.K., Humble, P. Clarebrough, L.M., Morton, A.J. & Forwood, T.
Computed Electron Micrographs and Defect Identification, p 75 vv.,
Amsterdam (North-Holland), 1973
- [13] Sinclair, R., Schneider, K. & Thomas, G.
Acta Met. 23, 873 (1975)

FIGUREN BIJ HOOFDSTUK IV

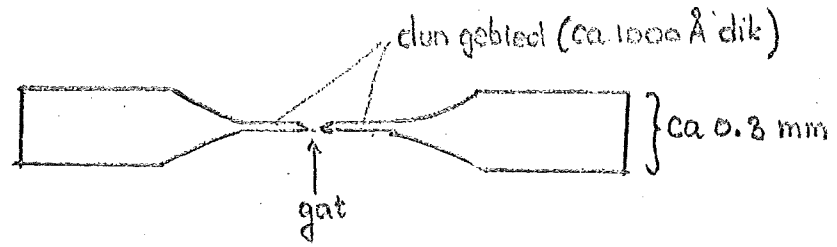


Fig 1. Preparaat na Electropolijsten

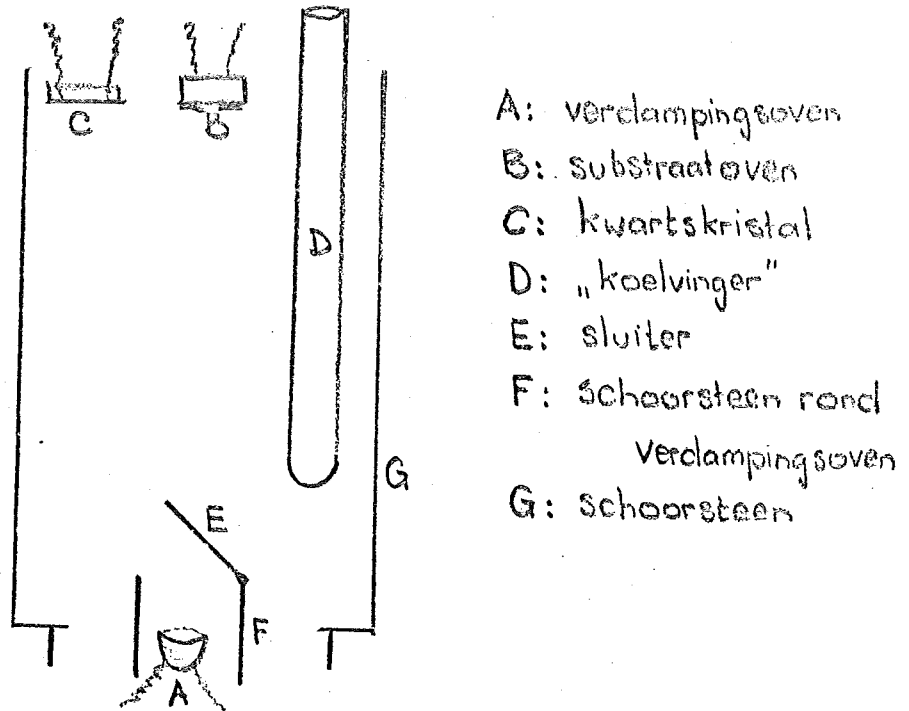


Fig. 2 Schematische weergave van de Opdamppopstelling

V RESULTATEN VAN DE EXPERIMENTEN

V-1 Het Opmeten van de Moiré-Patronen

Hoewel het in het algemeen aanbeveling verdient, nauwkeurige metingen te doen op de emulsiezijde van de fotografische plaat, werden alle metingen om praktische redenen verricht aan afdrukken van de platen (vergrotingsfactor $\pm 1,4$).

*de plaat zijn
te nauw?*

De vergrotingsfactor van de afdruk ten opzichte van de plaat bleek van afdruk tot afdruk kleine verschillen te hebben; door krimp van het papier was de vergrotingsfactor in verschillende richtingen van de afdruk evenmin constant. Om deze redenen werd van iedere afdruk de vergrotingsfactor in drie verschillende richtingen bepaald (horizontaal, verticaal en diagonaal), met behulp van op de plaat aanwezige merktekens. Afhankelijk van de richting, die de moiré-fringes op een bepaalde afdruk hadden, werd de vergrotingsfactor afdruk/plaat voor het moiré-patroon vastgesteld. Vermenigvuldiging van deze vergrotingsfactor met de microscoopvergroting (in vrijwel alle gevallen 126000 x) geeft dan de totale vergroting van het moiré-patroon.

Helderveld- en donkerveldmoiré-patronen werden met behulp van het bijbehorende diffractiepatroon gekarakteriseerd, gebruik makend van het feit, dat parallel-moiré-fringes loodrecht staan op de diffractievector (zie hoofdstuk I).

Moiré-fringes werden uitsluitend gemeten op plaatsen, waar geen kristalimperfecties in het moiré-patroon konden worden waargenomen. Op deze plaatsen zijn de moiré-patronen goed evenwijdig. Zo kon meestal op één afdruk op verschillende plaatsen de spatie van 3-10 fringes met lineaal en loep worden gemeten.

V-2 Resultaten van de Metingen

De resultaten van een aantal experimenten zijn hieronder in tabelvorm weergegeven. De tabellen V.1 t/m V.6 hebben betrekking op preparaten, die slechts éénmaal een warmtebehandeling hebben ondergaan.

In deze tabellen zijn aangegeven:

- g : de betreffende reflectie.
- M_t : de theoretische moiré-spatie voor diffusie, die voor de betreffende reflectie berekend wordt uit literatuurgegevens voor de roosterparameters van de beide componenten (Cu en Ni).
- \bar{M} : de gemiddelde waarde voor de moiré-spatie zoals die voor en na diffusie bepaald wordt.
- s : de standaarddeviaties voor de voor en na diffusie bepaalde moiré-spaties.
- n : het aantal metingen (ieder bestaande uit een middeling over (3-10) fringes) met de resultaten waarvan \bar{M} bepaald werd. Er werd gesteld dat aan $n \geq 6$ voldaan moest zijn alvorens de resultaten mee in beschouwing werden genomen.
- \bar{M}/M_t : de relatieve moiré-spatie (betrokken op de theoretische moiré-spatie voor diffusie).

Tabel V.7 heeft betrekking op een preparaat, dat in totaal vier uur op 500°C is geweest, echter tussentijds tot kamertemperatuur werd afgekoeld om de moiré-patternen in de verschillende diffusiestadiala te kunnen bestuderen. De eerste kolom geeft de effectieve diffusieduur aan, d.w.z. de tijd, dat het preparaat op 500°C in geweest; de volgende acht kolommen bevatten groot-heden, als in tabel V.1 t/m V.6, de laatste kolom geeft na bepaalde diffusie-duur het gemiddelde van \bar{M}/M_t over verschillende reflecties.

V-3. Discussie

V-3a. Reproduceerbaarheid van de Waarnemingen

De standaarddeviatie geeft, in combinatie met het aantal waarnemingen, een indicatie van de spreiding in de gemeten moiré-spaties.

Deze spreiding heeft verscheidene oorzaken:

- (i) de afleesfout bij het opmeten van de fringes.
- (ii) variaties in de vergroting van de microscoop.
- (iii) imperfecties in het bikristal, zoals dislocaties, die een lokaal in- of uitbuigen van de fringes ten gevolge hebben; deze fouten-bron werd zoveel mogelijk geëlimineerd, door uitsluitend te meten op plaatsen, waar de periodiciteit van de fringes visueel, zo perfect mogelijk was, maar kon nooit volledig worden geëlimineerd (zie ook V-1). (vervolg tekst op pagina 49).

Tabel V.1 METINGEN AAN PREPARAAT 750409/1 uur 550°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie				na diffusie			
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t
220	49.38	49.74	2.01	6	1.007	60.00	2.01	6	1.215
311	42.12					51.75	2.98	14	1.229

Tabel V.2 METINGEN AAN PREPARAAT 750424/1 uur 550°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie				na diffusie			
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	s	n	\bar{M}/M_t
220	49.38	50.46	3.17	6	1.022	60.78	0.88	9	1.231

Tabel V.3 METINGEN AAN PREPARAAT 750612/1 uur 550°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie				na diffusie			
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t
200	69.84					82.67	1.20	17	1.184
220	49.38					60.69	0.64	6	1.229

Tabel V.4 METINGEN AAN PREPARAAT 750604/2 uur 500°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie			na diffusie				
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t
200	69.84					77.52	1.32	16	1.110

Tabel V.5 METINGEN AAN PREPARAAT 750515/15 uur 500°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie			na diffusie				
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t
200	69.84	70.82	1.19	8	1.014	90.82	3.06	6	1.300
220	49.38	49.99	1.73	11	1.012				

Tabel V.6 METINGEN AAN PREPARAAT 750522/16 uur 450°C

g	$M_t(\text{\AA})$	voor diffusie			na diffusie				
		$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	n	\bar{M}/M_t
200	69.84					75.94	2.03	9	1.087
220	49.38	50.19	1.87	8	1.016				

Tabel V.7 METINGEN AAN PREPARAAT 750626

200 $M_t = 69.84 \text{ \AA}$				220 $M_t = 49.38 \text{ \AA}$					
t(h)	$\bar{M}(\text{\AA})$	s(\text{\AA})	n	\bar{M}/M_t	$\bar{M}(\text{\AA})$	s(\text{\AA})	n	\bar{M}/M_t	$\langle \bar{M} \rangle / M_t$
0	70.75	1.62	7	1.013	50.05	2.09	10	1.014	1.013
0.5	73.54	3.17	12	1.053	53.34	1.28	9	1.080	1.067
2.0	77.78	2.70	6	1.114	53.99	1.15	6	1.093	1.104
4.0					57.02	1.88	15	1.155	1.155

(iiii) lokale verschillen in dikte van één of beide delen van het bikristal; onze theorie voorspelt, dat de moiré-spatie na diffusie afhangt van de dikten (zie ook V-3b).

Het statistische karakter van bovenvermelde foutenbronnen, brengt met zich mee, dat het rekenkundig gemiddelde van de gemeten moiré-spaties als betrouwbare waarde moet worden aangemerkt. Het is om deze reden, dat alleen moiré-spaties, gebaseerd op meer dan vijf metingen in onze beschouwingen worden meegenomen.

De 220-moiré-spaties zijn bepaald aan drie verschillende preparaten die elk 1 uur op 550°C zijn verhit. De uitkomsten zijn:

prep. 750409	$\bar{M} = 60.00 \text{ \AA}$	$s = 2.01 \text{ \AA}$	$n = 9$
prep. 750424	$\bar{M} = 60.78 \text{ \AA}$	$s = 0.88 \text{ \AA}$	$n = 9$
prep. 750612	$\bar{M} = 60.69 \text{ \AA}$	$s = 0.64 \text{ \AA}$	$n = 6$

Uit deze tabel blijkt dat de reproduceerbaarheid hoog is. Vooral de uitkomsten, behorende bij prep. 750424 en prep. 750612 stemmen zeer goed overeen. De bovenvermelde gegevens tonen aan, dat \bar{M} betrouwbaarder is, dan men op grond van de bijbehorende standaarddeviatie zou verwachten.

Dezelfde conclusies kunnen worden getrokken uit vergelijking van de 200-moiré-spaties, bepaald aan twee preparaten, die elk 2 uur op 500°C zijn verhit. Deze zijn:

prep. 750604	$\bar{M} = 77.52 \text{ \AA}$	$s = 1.32 \text{ \AA}$	$n = 16$
prep. 750626	$\bar{M} = 77.78 \text{ \AA}$	$s = 2.70 \text{ \AA}$	$n = 6$

V-3b. De Moiré-spatie als Functie van de Diffusieduur

In tabel V-8 zijn de resultaten van de experimenten, gedaan bij een temperatuur van 500°C en verschillende diffusietijden nog eens samengevat. De experimenten zijn gedaan met de preparaten 750604, 750515 en 750626, waarvan de resultaten gegeven zijn in de tabellen V.4, V.5 en V.7.

Indien mogelijk zijn de waarden \bar{M}/M_T in tabel V.8 verkregen door middeling van de verhoudingen \bar{M}/M_T voor verschillende reflecties en voor de diffusieduur van 2 uur ook nog eens over twee verschillende preparaten.

klemt niet geheel

Voor $t = 0$ (geen diffusie) is het gemiddelde van alle (!) vóór diffusie gemeten fringes genomen..

Deze verhouding \bar{M}/M_T ($t = 0$) kan worden geïnterpreteerd als een systematische fout in de vergroting van de electronenmicroscop, maar ook als het resultaat van misfit-relaxatie (zie ook §III-3c en §III-4). Deze misfitrelaxatie brengt met zich mee, dat zelfs op $t = 0$ in de omgeving van $z = z_1$ een roosterparametergradiënt aanwezig is.

Tabel V-8 \bar{M}/M_t ALS FUNCTIE VAN DE DIFFUSIEDUUR BIJ 500°C

t (uren)	$\frac{\bar{M}}{M_T}$	$\ln \frac{\bar{M}}{M_T}$
0	1.012 <i>1.013</i>	0.012
0.5	1.067	0.065
2	1.107 <i>1.105</i>	0.102
4	1.155	0.144
15	1.300	0.263

Aan de hand van de waarden, vermeld in tabel V.8 is in fig. 1 $\ln(\bar{M}/M_T)$ uitgezet tegen \sqrt{t} . In zeer goede overeenstemming met het door ons ontwikkelde model (III.42) wordt een lineair verband gevonden.

V-3c. Berekening van Bulkdiffusiecoëfficiënten uit de Experimentele Gegevens

De helling van de rechte in fig. 1 is gelijk aan (III.42):

$$\text{helling} = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} \right) \sqrt{2D}$$

Nu is bij onze experimenten z_2 de dikte van de koperlaag. Deze bedroeg steeds 435 \AA (zie ook discussie in IV). De dikte z_1 van de nikkellaag is helaas onbekend. Het is echter hoogstwaarschijnlijk, dat deze gemiddeld ongeveer 1000 \AA bedraagt. Omdat $\langle z_1 \rangle$ ca. $2,5x$ groter is dan $\langle z_2 \rangle$, is de invloed van een variatie in z_1 op de grootte van de helling minder belangrijk.

Met $z_1 = 1000 \text{ \AA}$ en $z_2 = 435 \text{ \AA}$ wordt gevonden voor de interdiffusiecoëfficiënt bij 500°C

$$D_{500^\circ\text{C}} = 3.40 \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{s}$$

Voor diffusieëxperimenten bij 450°C en 550°C hebben wij de beschikking over twee punten:

Het 450°C experiment levert:

$$t = 0 \quad \bar{M}/M_t = 1.012 \quad t = 16\text{h} \quad \bar{M}/M_T = 1.087.$$

De helling van de rechte getrokken door deze twee punten levert voor de interdiffusiecoëfficiënt bij 450°C

$$D_{450^\circ\text{C}} = 2.62 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$$

Ook voor het 550°C experiment hebben wij de beschikking over twee punten:

$$t = 0 \quad \bar{M}/M_T = 1.012 \quad t = 1\text{h} \quad \bar{M}/M_T = 1.217.$$

De helling van de rechte, getrokken door deze twee punten levert voor de interdiffusiecoëfficiënt bij 550°C

$$D_{550^\circ\text{C}} = 2.79 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}.$$

V-3c. De bepaling van D_0 en de Activeringsenergie

De temperatuurafhankelijkheid van de diffusiecoëfficiënt wordt beschreven met de Arrhenius-betrekking:

$$D = D_0 e^{-Q/RT}$$

of
$$\ln D = \ln D_0 - \frac{Q}{RT}$$

In fig. 2 zijn de natuurlijke logaritmen van de door ons berekende interdiffusiecoëfficiënten uitgezet tegen de absolute temperatuur. Uit de helling van de rechte volgt voor de activeringsenergie

$$Q = 55.8 \text{ kcal/mol}$$

Voor D_0 wordt berekend

$$D_0 = 1.92 \text{ cm}^2/\text{s}$$

Wij kunnen de door ons gevonden waarde voor D_0 en Q vergelijken met D_0 en Q -waarden, berekend voor de diffusie van koper in zuiver nikkel en van nikkel in zuiver koper. Deze bulkdifusiecoëfficiënten zijn bij hoge temperaturen (700-1050°C) bepaald. Zie overzichtstabel in [1]. Monma et al [3] geven voor de diffusie van koper in zuiver nikkel

$$D_0 = 0.57 \text{ cm}^2/\text{s} \quad Q = 61.7 \text{ kcal/mol}$$

en voor de diffusie van nikkel in zuiver koper [2]

$$D_0 = 1.7 \text{ cm}^2/\text{s} \quad Q = 55.3 \text{ kcal/mol}$$

Wij kunnen concluderen, dat de door ons gevonden waarden van D_0 (1,92 cm²/s) en Q (55.8 kcal/mol) aantonen, dat de met onze methode bepaalde diffusiecoëfficiënten bulkdifusiecoëfficiënten zijn. Met onze methode is het echter niet mogelijk diffusiecoëfficiënten als functie van de concentratie te bepalen.

De door ons gevonden waarden liggen dicht bij de diffusiegegevens voor nikkel in zuiver koper (overigens lopen de literatuurgegevens nogal uiteen; zie [1]). Hogere waarden voor de diffusiecoëfficiënten kunnen mede in de hand gewerkt worden door imperfecties in de opgedampte koperlaag.

V-3d. Conclusie

Het is gebleken, dat de door ons ontwikkelde theorie zeer goed kwantitatief de verbreding van het moiré-patroon ten gevolge van interdiffusie beschrijft.

Het is niet mogelijk met onze methode diffusiecoëfficiënten als functie van de concentratie te berekenen.

De kracht van onze methode berust erop, dat bulkdifusiecoëfficiënten bij lage temperaturen in zeer dunne folies bepaald kunnen worden.

schijf 1 ↗
↘

2. Methode van de Kypen

Literatuur

- [1] Delhez, R. & Mittemeijer, E.J.
Intern rapport, januari 1975
- [2] Monma, F.
Diffusion Data, 2, 271 (1968)
- [3] Monma, F.
Diffusion Data, 4, 440 (1970)

Fig. 1: $\ln \frac{M}{M_T}$ tegen \sqrt{t} bij 500°C

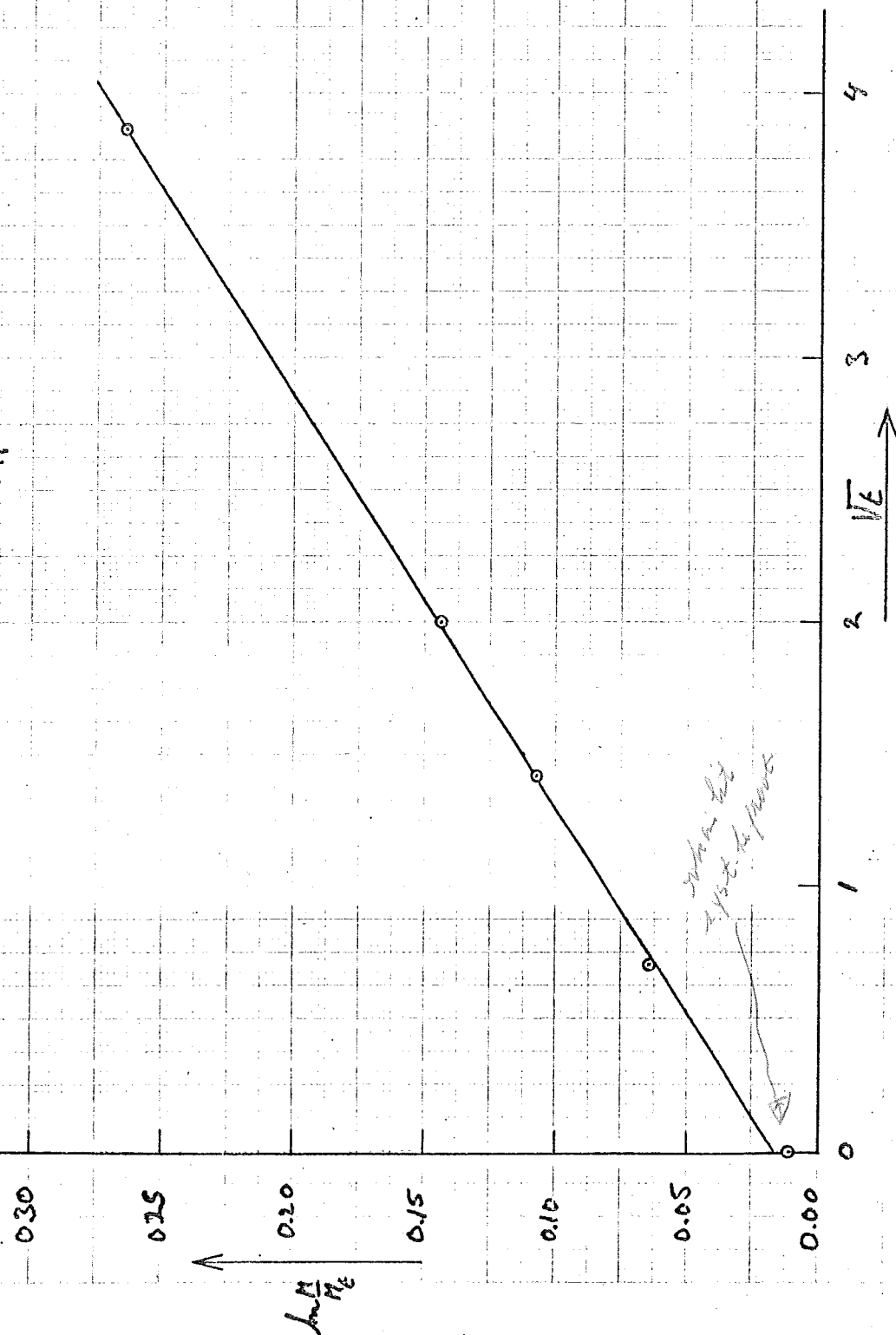
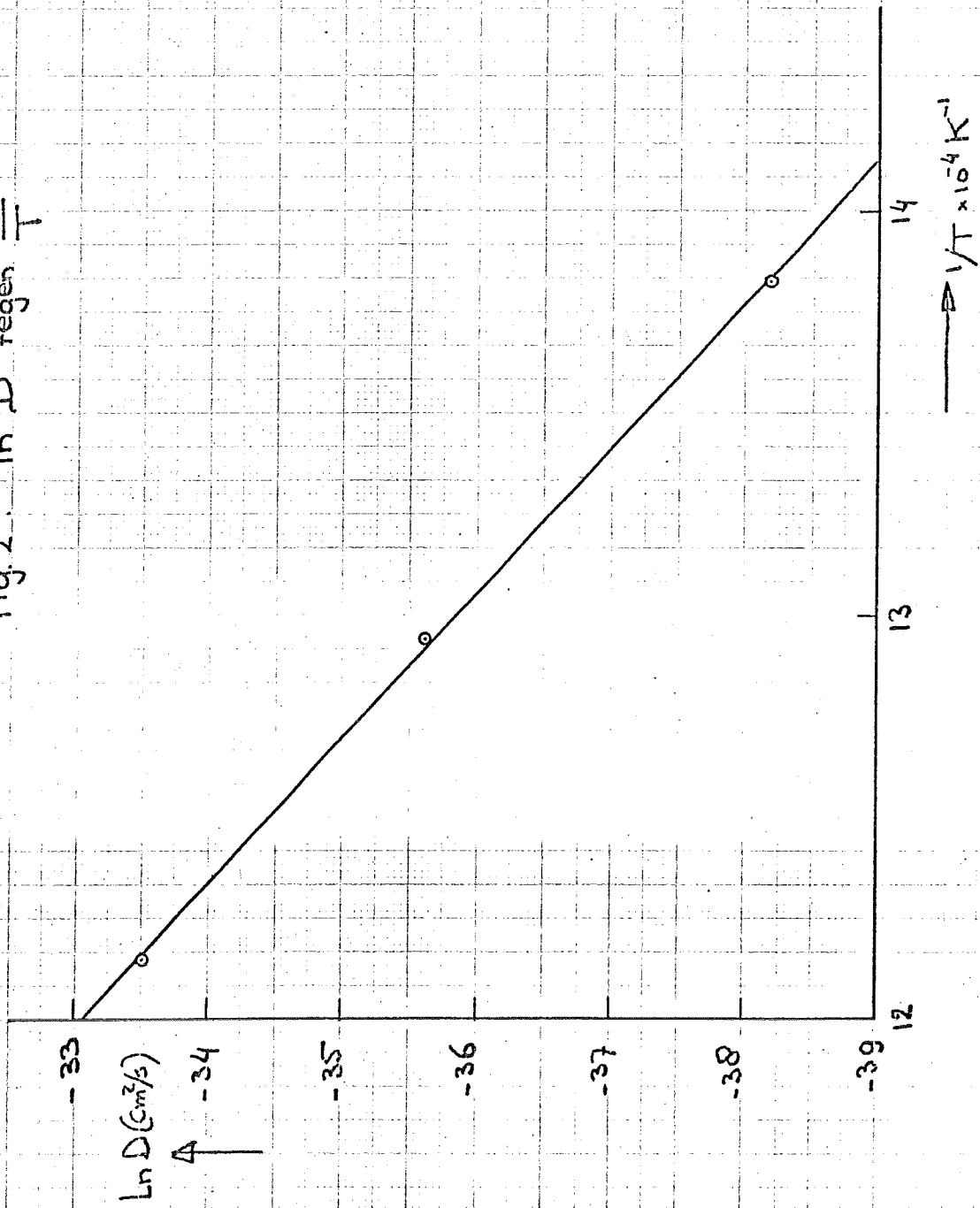


Fig. 2: $\ln D$ tegen $\frac{1}{T}$



APPENDICES

Appendix A

EEN KORT OVERZICHT VAN DE VERSCHILLENDE BESCHRIJVINGSWIJZEN

IN DE DYNAMISCHE DIFFRACTIETHEORIE

Bij de bestudering van de literatuur over dynamische (electronen) diffractie blijkt, dat er een aantal manieren zijn, waarop men zich het golfveld in het kristal opgebouwd kan denken. De methoden zijn alle gelijkwaardig, maar elk heeft zijn specifieke toepassingsgebied.

Omdat de verschillen in aanpak bij de verschillende methoden subtiel zijn, en het zaak is de verschillende methoden, ondanks hun gelijkwaardigheid, niet te verwarren, lijkt het dienstig ze hier, voorzien van een korte samenvatting te rubriceren.

De hier vermelde formuleringen hebben alle betrekking op het tweestraalsgeval.

1. De Golfmechanische Formulering

1a. De Blochgolfrepresentatie

De theorie hiervoor kan men o.a. vinden bij Schapink (blz 12 e.v.) en van Dijk, nov. 1973.

Hierbij wordt de Schrödinger-vergelijking in een periodieke potentiaal opgelost. Als oplossingen komen naar voren de twee Bloch-golven $b^{(1)}(\underline{k}, \underline{r})$ en $b^{(2)}(\underline{k}, \underline{r})$, waarbij:

$$b^{(1)}(\underline{k}^{(1)}, \underline{r}) = C_0^{(1)} \exp 2\pi i(\underline{k}^{(1)} \cdot \underline{r}) + C_g^{(1)} \exp 2\pi i(\underline{k}^{(1)} + \underline{g}) \cdot \underline{r} \quad (\text{A.1})$$

$$\text{en } b^{(2)}(\underline{k}^{(2)}, \underline{r}) = C_0^{(2)} \exp 2\pi i(\underline{k}^{(2)} \cdot \underline{r}) + C_g^{(2)} \exp 2\pi i(\underline{k}^{(2)} + \underline{g}) \cdot \underline{r} \quad (\text{A.2})$$

Lit de Schrödinger-vergelijking volgen twee waarden voor \underline{k} , nl $\underline{k}^{(1)}$ en $\underline{k}^{(2)}$. Bij $\underline{k}^{(1)}$ hoort de set coëfficiënten $C_0^{(1)}, C_g^{(1)}$ en bij $\underline{k}^{(2)}$ hoort de set coëfficiënten $C_0^{(2)}, C_g^{(2)}$.

De totale golf functie in het kristal, $\psi(\underline{r})$ is een lineaire combinatie van $b^{(1)}(\underline{k}^{(1)}, \underline{r})$ en $b^{(2)}(\underline{k}^{(2)}, \underline{r})$. Aldus:

$$\Psi(\underline{r}) = A^{(1)} b^{(1)}(\underline{k}^{(1)}, \underline{r}) + A^{(2)} b^{(2)}(\underline{k}^{(2)}, \underline{r}) \quad (\text{A.3})$$

$A^{(1)}$ en $A^{(2)}$ zijn de excitatieamplituden van de Blochgolven 1 en 2. Zij kunnen worden bepaald uit de randvoorwaarden bij $z=0$.

1b De Darwin Representatie

Hierbij wordt het totale golfveld $\Psi(\underline{r})$ niet opgebouwd gedacht uit een superpositie van Bloch-golven, zoals in 1a maar uit een superpositie van de totale amplitude van de doorgaande bundel en de totale amplitude van de gediffracteerde bundel.

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_0(\underline{r}) + \Psi_g(\underline{r}) \quad (\text{A.4})$$

Hierin zijn $\Psi_0(\underline{r})$ en $\Psi_g(\underline{r})$ respectievelijk gedefinieerd door:

$$\Psi_0(\underline{r}) = A^{(1)} C_0^{(1)} \exp(\underline{k}^{(1)} \cdot \underline{r}) + A^{(2)} C_0^{(2)} \exp(\underline{k}^{(2)} \cdot \underline{r}) \quad (\text{A.5})$$

$$\text{en } \Psi_g(\underline{r}) = A^{(1)} C_g^{(1)} \exp(\underline{k}^{(1)} + \underline{g}) \cdot \underline{r} + A^{(2)} C_g^{(2)} \exp(\underline{k}^{(2)} + \underline{g}) \cdot \underline{r} \quad (\text{A.6})$$

Substitutie van (A.5) en (A.6) in (A.4) laat onmiddellijk de equivalentie met (A.3) zien, maar ook een verschil kan ons niet ontgaan: vergelijking (A.3) is flexibel met betrekking tot de aan het systeem opgelegde randvoorwaarden, zodat bij verandering van randvoorwaarden alleen de excitatieamplituden $A^{(1)}$ en $A^{(2)}$ veranderen. Daarentegen leidt het veranderen van randvoorwaarden bij de Darwinrepresentatie tot een verandering van de basisgolf functies $\Psi_0(\underline{r})$ en $\Psi_g(\underline{r})$.

2 De Golf - Optische Formulering

Uitgangspunt hiervoor zijn de differentiaalvergelijkingen van Howie en Whelan. Deze vergelijkingen zijn mathematisch moeilijk af te leiden, hetgeen o.a. het gevolg is van het feit, dat de Darwinrepresentatie, waarop de vergelijkingen berusten, eigenlijk geen logische methode is

om het probleem van de electronendiffractie in periodieke media aan te pakken. Hirsch c.s (blz 196 e.v.) beperken zich er toe de vergelijkingen plausibel te maken, en erop te wijzen, dat de formele rechtvaardiging van de Howie-Whelan vergelijkingen volgt uit het feit, dat de ermee behaalde resultaten consistent zijn met de resultaten, die met de "nettere" golfmechanische methode kunnen worden behaald.

De Howie-Whelan vergelijkingen zijn de gekoppelde lineaire differentiaalvergelijkingen:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\varphi_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i g \cdot R) \\ \frac{d\varphi_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i g \cdot R) \end{aligned} \right\} \quad (A.7)$$

De Howie-Whelan vergelijkingen zijn analytisch oplosbaar als $R=0$ (voor een perfect kristal) en als R geen functie is van de diepte in het kristal, zoals het geval is bij stapelfouten en epitactische bikristallen. Zie wat betreft deze laatste "imperfectie" hoofdstuk II van dit verslag. Uit de oplossing van de Howie-Whelan vergelijkingen volgen twee onderling onafhankelijke sets oplossingen, nl:

$$\varphi_0^{(1)}(z) = C_0^{(1)} \exp(2\pi i f_0^{(1)} z) \quad , \quad \varphi_g^{(1)}(z) = C_g^{(1)} \exp(2\pi i f_g^{(1)} z) \quad (A.8)$$

$$\text{en } \varphi_0^{(2)}(z) = C_0^{(2)} \exp(2\pi i f_0^{(2)} z) \quad , \quad \varphi_g^{(2)}(z) = C_g^{(2)} \exp(2\pi i f_g^{(2)} z) \quad (A.9)$$

Hierin zijn de f 's bekende grootheden en liggen de verhoudingen $C_0^{(1)}/C_g^{(1)}$ en $C_0^{(2)}/C_g^{(2)}$ in de oplossing van de differentiaalvergelijkingen besloten.

Om het totale golfveld in het kristal op te bouwen zijn er nu twee mogelijkheden 2a en 2b, die een analogie hebben met resp. 1a en 1b die bij de golfmechanische behandeling besproken zijn.

2a De Blochgolffrepresentatie

Het totale golfveld in het kristal wordt beschreven als een lineaire combinatie van de beide, uit de Howie-Whelanvergelijkingen volgende, oplossingen.

Dus:

$$\Psi(z) = A^{(1)} \left\{ \psi_0^{(1)}(z) + \psi_g^{(1)}(z) \right\} + A^{(2)} \left\{ \psi_0^{(2)}(z) + \psi_g^{(2)}(z) \right\} \quad (\text{A.10})$$

Deze beschrijving in termen van Blochgolven is, formeel gezien, de meest logische representatie van de oplossing van de Howie-Whelanvergelijkingen.

Het kenmerk van de dynamische diffractietheorie, nl de interactie tussen doorgaande en gediffracteerde bundel, komt er goed in tot uitdrukking.

In de praktijk evenwel zijn wij meestal geïnteresseerd in de amplitude en intensiteit in de richting van doorgaande en gediffracteerde bundel. In dat geval is de Darwinrepresentatie te verkiezen.

2b De Darwinrepresentatie

Hierbij wordt (A.10) gerecombineerd tot:

$$\Psi(z) = \left\{ A^{(1)} \psi_0^{(1)}(z) + A^{(2)} \psi_0^{(2)}(z) \right\} + \left\{ A^{(1)} \psi_g^{(1)}(z) + A^{(2)} \psi_g^{(2)}(z) \right\} \quad (\text{A.11})$$

$$= \psi_0(z) + \psi_g(z) \quad (\text{A.12})$$

Hierin zijn $\psi_0(z)$ en $\psi_g(z)$ respectievelijk de totale amplituden in de richting van de doorgaande en van de gediffracteerde bundel.

Deze methode is zeer geschikt om het helderveld- en donkerveldcontrast van verschillende roosterfouten te berekenen.

Head c.s en Thölen gebruikten deze methode om van iedere kolom in het verplaatsingsveld van een dislocatie de waarden van ψ_0 en ψ_g aan de onderkant van het folie te evalueren en met behulp van een bepaalde zwartingschaal het contrast van de dislocatie met de computer te simuleren.

2C Een variant op de Darwinrepresentatie

Analyt. Appendix
 t_{min} = t_{max} = P

Met (A.8) en (A.9) volgt, dat:

$$\psi_0(z) = A^{(1)} C_0^{(1)} \exp(2\pi i f_0^{(1)} z) + A^{(2)} C_0^{(2)} \exp(2\pi i f_0^{(2)} z) \quad (\text{A.13})$$

$$\text{en } \psi_g(z) = A^{(1)} C_g^{(1)} \exp(2\pi i f_g^{(1)} z) + A^{(2)} C_g^{(2)} \exp(2\pi i f_g^{(2)} z) \quad (\text{A.14})$$

Zoals reeds werd vermeld liggen de verhoudingen $C_0^{(1)}/C_g^{(1)}$ en $C_0^{(2)}/C_g^{(2)}$ in de oplossing van de Howie-Whelanvergelijkingen besloten.

De absolute waarde van de coëfficiënten volgt uit de normeringsvoorwaarde voor de Blochfuncties:

$$|C_0^{(1)}|^2 + |C_0^{(2)}|^2 = |C_g^{(1)}|^2 + |C_g^{(2)}|^2 = 1 \quad (\text{A.15})$$

En de waarden van $A^{(1)}$ en $A^{(2)}$ uit de randvoorwaarden

$$\psi_0(0) = A^{(1)} C_0^{(1)} + A^{(2)} C_0^{(2)} = 1 \quad (\text{A.16})$$

$$\psi_g(0) = A^{(1)} C_g^{(1)} + A^{(2)} C_g^{(2)} = 0 \quad (\text{A.17})$$

We zien dus, dat het eigenlijk helemaal niet nodig is om de waarden van $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$, $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ te kennen.

Volgens (A.13) en (A.14) liggen $\psi_0(z)$ en $\psi_g(z)$ volledig vast, als de producten $A^{(1)} C_0^{(1)}$, $A^{(2)} C_0^{(2)}$, $A^{(1)} C_g^{(1)}$ en $A^{(2)} C_g^{(2)}$ bekend zijn.

Tussen deze vier grootheden hebben we vier betrekkingen, nl (A.16) en (A.17) en de betrekkingen:

$$\frac{A^{(1)} C_0^{(1)}}{A^{(1)} C_g^{(1)}} = \frac{C_0^{(1)}}{C_g^{(1)}} = \text{bekend} \quad (\text{A.18})$$

$$\text{en } \frac{A^{(2)} C_0^{(2)}}{A^{(2)} C_g^{(2)}} = \frac{C_0^{(2)}}{C_g^{(2)}} = \text{bekend} \quad (\text{A.19})$$

Hiermede is aansluiting gevonden bij de methode, zoals die door Gevers en in dit verslag, wordt gevolgd.

In het verslag van laatstgenoemde zijn de randvoorwaarden in de daarin gebezigde coëfficiënten $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$, $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ besloten, wegens:

$$\left. \begin{aligned} C_0^{(1)}(\text{r.v.w.}) &= A^{(1)}(\text{r.v.w.}) \cdot C_0^{(1)} \\ C_0^{(2)}(\text{r.v.w.}) &= A^{(2)}(\text{r.v.w.}) \cdot C_0^{(2)} \\ C_g^{(1)}(\text{r.v.w.}) &= A^{(1)}(\text{r.v.w.}) \cdot C_g^{(1)} \\ C_g^{(2)}(\text{r.v.w.}) &= A^{(2)}(\text{r.v.w.}) \cdot C_g^{(2)} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.20})$$

Hiermee is aangegeven op welke wijze de door ons gebezigde variant samenhangt met de formele schrijfwijze voor de Darwin-representatie

Literatuur

T. van Dijk ; intern rapport december 1973

R. Gevers ; Phil. Mag. 7 (II), 1681-1720 (1962)

Head, A.K., Humble, P., L.M. Clarebrough, A.J. Morton en C.T. Forwood ;
"Computed Electron Micrographs and Defect Identification"
(1973) Amsterdam (North Holland Publ. Company)

P.B. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley en M.J. Whelan ;
"Electron Microscopy of Thin Crystals"
(1965) Londen (Butterworth)

F.W. Schapink ; dictaat "Dynamische Theorie van de Elektronen-
diffractie in dunne kristallen" (interne publicatie)

A.R. Thölen ; Phil. Mag. 22, 175 (1970)

Appendix B

OPLOSSING VAN DE HOWIE-WHELAN-VERGELIJKINGEN VOOR EEN

PERFECT KRISTAL, ONDER VERWAARLOZING VAN ANOMALE ABSORPTIE

De Howie-Whelanvergelijkingen voor het tweestraalsgeval, zonder anomale absorptie, zijn voor een perfect kristal:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\varphi_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_g \exp(2\pi i s z) \\ \frac{d\varphi_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_0 \exp(-2\pi i s z) \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.1})$$

Met stelsel vergelijkingen (B.1) kan opgelost worden door van de twee gekoppelde eerste-orde differentiaalvergelijkingen één tweede-orde differentiaalvergelijking te maken. Uit het stelsel (B.1) volgt:

$$\frac{d^2\varphi_0}{dz^2} = \frac{\pi i}{\xi_0} \frac{d\varphi_0}{dz} + \frac{\pi i}{\xi_g} \frac{d\varphi_g}{dz} \exp(2\pi i s z) - \frac{2\pi^2 s}{\xi_g} \varphi_g \exp(2\pi i s z) \quad (\text{B.2a})$$

$$\varphi_g = \frac{\xi_g}{\pi i} \left(\frac{d\varphi_0}{dz} - \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_0 \right) \exp(-2\pi i s z) \quad (\text{B.2b})$$

$$\text{en } \frac{d\varphi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_0 \exp(-2\pi i s z) \quad (\text{B.2c})$$

Substitutie van (II.3B) en (II.3C) in (II.3A) levert:

$$\frac{d^2\varphi_0}{dz^2} - \left(\frac{2\pi i}{\xi_0} + 2\pi i s \right) \frac{d\varphi_0}{dz} - \left(\frac{\pi^2}{\xi_0^2} - \frac{\pi^2}{\xi_g^2} + \frac{2\pi^2 s}{\xi_0} \right) \varphi_0 = 0 \quad (\text{B.3})$$

Als oplossing van differentiaalvergelijking (B.3) proberen we:

$$\varphi_0 = C_0 e^{2\pi i \gamma_0 z}$$

Substitutie hiervan in (II.4) levert:

$$4\gamma_0^2 - 4\left(\frac{1}{\xi_0} + s\right)\gamma_0 + \left(\frac{1}{\xi_0^2} - \frac{1}{\xi_g^2} + \frac{2s}{\xi_0}\right) = 0 \quad (\text{B.4})$$

Hieruit volgen twee waarden van γ en wel:

$$\gamma_0^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} + s \right) + \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_g^2}} \quad (\text{B.5a})$$

$$\text{en } \gamma_0^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} + s \right) - \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_g^2}} \quad (\text{B.5b})$$

De volledige oplossing van (B.3) bestaat uit een lineaire combinatie van de aldus gevonden $\varphi_0^{(1)}$ en $\varphi_0^{(2)}$.

$$\Psi_0 = \varphi_0^{(1)} + \varphi_0^{(2)} = C_0^{(1)} e^{2\pi i \gamma_0^{(1)} z} + C_0^{(2)} e^{2\pi i \gamma_0^{(2)} z} \quad (\text{B.6})$$

De constanten $C_0^{(1)}$ en $C_0^{(2)}$ in vergelijking (B.6) zijn niet willekeurig, maar worden bepaald uit de bij de vergelijkingen (B.1) behorende randvoorwaarden voor $z=0$.

Wij komen hier aanstonds op terug; eerst zullen wij trachten een betrekking te vinden voor φ_g , de amplitude van de geblijffacteerde bundel.

Dit kan op verschillende manieren gebeuren; het is het eenvoudigst, de verhoudingen $\varphi_g^{(1)}/\varphi_0^{(1)}$ respectievelijk $\varphi_g^{(2)}/\varphi_0^{(2)}$ te bepalen door substitutie van respectievelijk $\varphi_0^{(1)}$ en $\varphi_0^{(2)}$ in de bovenste vergelijking van het stelsel (B.1)

Dit levert voor $\varphi_0^{(1)}$:

$$2\pi i \gamma_0^{(1)} \varphi_0^{(1)} = \frac{\pi i}{\xi_0} \varphi_0^{(1)} + \frac{\pi i}{\xi_g} \varphi_g^{(1)} \exp(2\pi i s z)$$

$$\text{of} \quad \frac{\psi_g^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} = \left(2 \sum \xi_g f_0^{(1)} - \frac{\sum \xi_g}{\sum \xi_0} \right) e^{-2\pi i s z} \quad (\text{B.7})$$

Substitutie van (B.5a) in (B.7) levert:

$$\frac{\psi_g^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} = \left(\sum \xi_g s + \sum \xi_g \sigma \right) e^{-2\pi i s z} \quad (\text{B.8})$$

$$\text{waarin } \sigma = \sqrt{s^2 + \frac{1}{\sum \xi_g^2}}.$$

Men is gewoon te schrijven $\sum \xi_g s = \omega$, waaruit volgt $\sum \xi_g \sigma = \sqrt{\omega^2 + 1}$.
Nu volgt voor (B.8)

$$\frac{\psi_g^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} = (\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-2\pi i s z} \quad (\text{B.9a})$$

Op analoge wijze is af te leiden, dat

$$\frac{\psi_g^{(2)}}{\psi_0^{(2)}} = (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-2\pi i s z} \quad (\text{B.9b})$$

Uit (B.9a) volgt:

$$\psi_g^{(1)} = (\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}) C_0^{(1)} e^{2\pi i (f_0^{(1)} - s) z} \quad (\text{B.10a})$$

Uit (B.9b) volgt:

$$\psi_g^{(2)} = (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) C_0^{(2)} e^{2\pi i (f_0^{(2)} - s) z} \quad (\text{B.10b})$$

Nu is

$$\psi_g = \psi_g^{(1)} + \psi_g^{(2)} = C_g^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z} + C_g^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z} \quad (\text{B.11})$$

Vergelijking van (B.11), (B.10.a) en (B.10b) leert dat;

$$C_g^{(1)} = (\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}) C_o^{(1)} \quad (\text{B.12})$$

$$f_g^{(1)} = f_o^{(1)} - s \quad (\text{B.13})$$

$$C_g^{(2)} = (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) C_o^{(2)} \quad (\text{B.14})$$

$$f_g^{(2)} = f_o^{(2)} - s \quad (\text{B.15})$$

Als de coëfficiënten $C_o^{(1)}$, $C_o^{(2)}$, $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ bekend zijn, kunnen de amplituden ψ_o en ψ_g van respectievelijk de doorgaande - en de gediffractioneerde bundel berekend worden.

Tussen de vier coëfficiënten bestaan vier betrekkingen. Twee betrekkingen zijn al expliciet vermeld, nl (B.12) en (B.14). De twee resterende betrekkingen volgen uit de randvoorwaarden bij de intreke van de bundel in het kristal (op $z=0$). De randvoorwaarden zijn:

$$\psi_o(z=0) = 1 \quad (\text{B.16a})$$

$$\text{en } \psi_g(z=0) = 0 \quad (\text{B.16b})$$

Uit (B.16a) volgt met (B.6):

$$C_o^{(1)} + C_o^{(2)} = 1 \quad (\text{B.17})$$

en uit (B.16b) volgt met (B.11):

$$C_g^{(1)} + C_g^{(2)} = 0 \quad (\text{B.18})$$

Tezamen met (B.12) en (B.14) volgt uit (B.17) en (B.18)

$$C_0^{(1)} = \frac{-\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}}{2\sqrt{\omega^2 + 1}} \quad (\text{B.19a})$$

$$C_0^{(2)} = \frac{+\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}}{2\sqrt{\omega^2 + 1}} \quad (\text{B.19b})$$

$$C_g^{(1)} = \frac{+1}{2\sqrt{\omega^2 + 1}} \quad (\text{B.19c})$$

$$C_g^{(2)} = \frac{-1}{2\sqrt{\omega^2 + 1}} \quad (\text{B.19d})$$

Met de uitdrukkingen (B.19) en de reeds berekende waarden van $f_0^{(1)}$, $f_0^{(2)}$, $f_g^{(1)}$ en $f_g^{(2)}$ liggen de amplituden ψ_0 en ψ_g als functie van de diepte in het kristal volledig vast.

Alvorens de intensiteiten van doorgaande en gediffracteerde bundel te berekenen, brengen we nog een vereenvoudiging aan in de notatie:

$$f_0^{(1)} = t \quad (\text{B.20a})$$

$$\text{Lit (B.5b) volgt: } f_0^{(2)} = t - \sigma \quad (\text{B.20b})$$

$$\text{Lit (B.13) volgt: } f_g^{(1)} = t - s \quad (\text{B.20c})$$

$$\text{Lit (B.15) volgt: } f_g^{(2)} = t - \sigma - s \quad (\text{B.20d})$$

Met (B.20a) en (B.20b) wordt (B.6):

$$\psi_0 = C_0^{(1)} e^{2\pi i t z} + C_0^{(2)} e^{2\pi i (t - \sigma) z} \quad (\text{B.21})$$

De intensiteit van de doorgaande bundel is

$$I_0 = \psi_0 \cdot \psi_0^*$$

$$I_0 = e^{2\pi i t z} (C_0^{(1)} + C_0^{(2)} e^{-2\pi i \delta z}) e^{-2\pi i t z} (C_0^{(1)} + C_0^{(2)} e^{+2\pi i \delta z})$$

$$= (C_0^{(1)})^2 + (C_0^{(2)})^2 + 2 C_0^{(1)} C_0^{(2)} \cos 2\pi \delta z \quad (\text{B.22})$$

Met de waarden voor $C_0^{(1)}$ en $C_0^{(2)}$ uit (B.19) volgt dat

$$I_0 = \frac{2\omega^2 + 1}{2(\omega^2 + 1)} + \frac{1}{2(\omega^2 + 1)} \cos 2\pi \delta z \quad (\text{B.23})$$

De intensiteit van de gediffracteerd bundel is:

$$I_g = \psi_g \cdot \psi_g^*$$

$$I_g = (C_g^{(1)} e^{2\pi i (t-s)z} + C_g^{(2)} e^{2\pi i (t-\delta-s)z}) (C_g^{(1)} e^{-2\pi i (t-s)z} + C_g^{(2)} e^{-2\pi i (t-\delta-s)z})$$

$$= (C_g^{(1)})^2 + (C_g^{(2)})^2 + 2 C_g^{(1)} C_g^{(2)} \cos 2\pi \delta z \quad (\text{B.24})$$

Met de waarden voor $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ uit (B.19) volgt nu dat:

$$I_g = \frac{1}{2(\omega^2 + 1)} - \frac{1}{2(\omega^2 + 1)} \cos 2\pi \delta z \quad (\text{B.25})$$

Appendix C

BEREKENING VAN HET CONTRAST VAN ZUIVERE MOIRÉ-PATRONEN

Basis van de berekeningen is het model, beschreven in II-1 van dit verslag. De berekening komt neer op het oplossen van de Howie-Whelanvergelijkingen, die voor het tweestraalsgeval, met verwaarlozing van anormale absorptie luiden:

$$\frac{d\psi_0}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \psi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \psi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i g \cdot \underline{R}) \quad (C.1)$$

$$\frac{d\psi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \psi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \psi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i g \cdot \underline{R})$$

Nu is voor $0 \leq z \leq z_1$: $2\pi i g \cdot \underline{R} = 2\pi i g \cdot \underline{0} = 0$

en voor $z_1 < z \leq z_2$: $2\pi i g \cdot \underline{R} = i\alpha$

waarin $\alpha = -2\pi |\Delta g| \cdot x$

Nu geldt op $z = z_1$ (zie appendix B) :

$$\psi_0(z_1) = C_0^{(1)} e^{2\pi i f_0^{(1)} z_1} + C_0^{(2)} e^{2\pi i f_0^{(2)} z_1} \quad (C.2a)$$

$$\psi_g(z_1) = C_g^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z_1} + C_g^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z_1} \quad (C.2b)$$

In het tweede gedeelte van het kristal (d.w.z. voor $z_1 < z \leq z_1 + z_2$) kan voor de amplituden van doorgaande - en gediffracteerde bundel worden geschreven :

$$\psi_0(z (z_1 < z \leq z_1 + z_2)) = D_0^{(1)} e^{2\pi i f_0^{(1)} z} + D_0^{(2)} e^{2\pi i f_0^{(2)} z} \quad (C.3a)$$

$$\psi_g(z (z_1 < z \leq z_1 + z_2)) = D_g^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z} + D_g^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z} \quad (C.3b)$$

Uiteraard zijn de coëfficiënten in de vergelijkingen (C.3) anders, dan in de vergelijkingen (C.2); wij zagen immers in appendices A en B, dat deze

coëfficiënten functies zijn van de randvoorwaarden.

De coëfficiënten $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$, $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ volgen uit de randvoorwaarden op $z=0$. De coëfficiënten $D_0^{(1)}$, $D_0^{(2)}$, $D_g^{(1)}$ en $D_g^{(2)}$ kunnen worden berekend uit de randvoorwaarden op $z=z_1$.

De randvoorwaarden op $z=z_1$ eisen dat:

$$D_0^{(1)} e^{2\pi i f_0^{(1)} z_1} + D_0^{(2)} e^{2\pi i f_0^{(2)} z_1} = C_0^{(1)} e^{2\pi i f_0^{(1)} z_1} + C_0^{(2)} e^{2\pi i f_0^{(2)} z_1} = \psi_0(z_1) \quad (C.4a)$$

$$D_g^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z_1} + D_g^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z_1} = C_g^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z_1} + C_g^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z_1} = \psi_g(z_1) \quad (C.4b)$$

Verder kan, zoals ook bij het perfecte kristal (appendix B) geschiedde, een relatie gevonden tussen $D_0^{(1)}$ en $D_g^{(1)}$ en tussen $D_0^{(2)}$ en $D_g^{(2)}$

Substitutie van $\psi_0^{(1)} = D_0^{(1)} e^{2\pi i f_0^{(1)} z}$ en $\psi_0^{(2)} = D_0^{(2)} e^{2\pi i f_0^{(2)} z}$ in de bovenste vergelijking van het stelsel (C.1) levert:

$$D_g^{(1)} = (\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} D_0^{(1)} \quad (C.5a)$$

$$D_g^{(2)} = (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} D_0^{(2)} \quad (C.5b)$$

Substitutie van (C.5a) en (C.5b) in (C.4b) levert:

$$(\omega + \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} D_0^{(1)} e^{2\pi i f_g^{(1)} z_1} + (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} D_0^{(2)} e^{2\pi i f_g^{(2)} z_1} = \psi_g(z_1) \quad (C.6)$$

(C.4a) en (C.6) zijn nu twee vergelijkingen met twee onbekenden, nl. $D_0^{(1)}$ en $D_0^{(2)}$.

Onder gebruikmaking van de relaties tussen de γ 's (vergelijkingen (B.20) van appendix B) volgt:

$$D_0^{(1)} = \frac{\psi_g(z_1) - (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} e^{-2\pi i f_g^{(2)} z_1} \psi_0(z_1)}{2\sqrt{\omega^2 + 1} e^{-i\alpha} e^{+2\pi i (t-s) z_1}} \quad (C.7a)$$

$$D_0^{(2)} = \frac{\psi_0(z_1) e^{-2\pi i t z_1} - D_0^{(1)}}{e^{-2\pi i s z_1}} \quad (C.7b)$$

Met de substituties:

$$T(z_1) = \psi_0(z_1) e^{-2\pi i t z_1} \quad (C.8a)$$

$$\text{en } S(z_1) = \psi_g(z_1) e^{-2\pi i (t-s) z_1} \quad (C.8b)$$

krijgen de betrekkingen (C.7a) en (C.7b) nog iets eenvoudiger betrekkingen:

$$D_0^{(1)} = \frac{S(z_1) - (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} T(z_1)}{2\sqrt{\omega^2 + 1} e^{-i\alpha}} \quad (C.9a)$$

$$D_0^{(2)} = \frac{T(z_1) - D_0^{(1)}}{e^{-2\pi i \epsilon z_1}} \quad (C.9b)$$

Op $z = z_1 + z_2$ wordt de amplitude van de doorgaande bundel nu gegeven door:

$$\psi_0(z_1 + z_2) = D_0^{(1)} e^{2\pi i t(z_1 + z_2)} + D_0^{(2)} e^{2\pi i (t-\epsilon)(z_1 + z_2)} \quad (C.10)$$

Voor de intensiteit van de doorgaande bundel op $z = z_1 + z_2$ volgt:

$$I_0(z_1 + z_2) = \psi_0(z_1 + z_2) \psi_0^*(z_1 + z_2)$$

$$I_0(z_1 + z_2) = D_0^{(1)} D_0^{(1)*} + D_0^{(2)} D_0^{(2)*} + D_0^{(1)} D_0^{(2)*} e^{2\pi i \epsilon(z_1 + z_2)} + D_0^{(1)*} D_0^{(2)} e^{-2\pi i \epsilon(z_1 + z_2)} \quad (C.11)$$

Met behulp van (C.9a) en (C.9b) kunnen nu de afzonderlijke termen van het rechterlid van (C.11) berekend worden.

$$D_0^{(1)} D_0^{(1)*} = \frac{1}{4(\omega^2 + 1)} \left\{ I_g(z_1) + (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1})^2 I_0(z_1) + \right. \\ \left. - S(z_1) T^*(z_1) (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{i\alpha} - T(z_1) S^*(z_1) (\omega - \sqrt{\omega^2 + 1}) e^{-i\alpha} \right\} \quad (C.12)$$

Verder is:

$$D_0^{(2)} D_0^{(2)*} = I_0(z_1) + D_0^{(1)} D_0^{(1)*} - T(z_1) D_0^{(1)*} - T^*(z_1) D_0^{(1)} \quad (C.13)$$

In (C.13) zijn $T(z_1) D_0^{(1)*}$ en $T^*(z_1) D_0^{(1)}$ nog onbekend.

Deze worden nu berekend:

$$T(z_1) D_0^{(1)*} = \frac{1}{2\sqrt{\omega^2+1}} \left\{ T(z_1) S^*(z_1) e^{-i\alpha} - (\omega - \sqrt{\omega^2+1}) I_0(z_1) \right\} \quad (C.14)$$

$$T^*(z_1) D_0^{(1)} = \frac{1}{2\sqrt{\omega^2+1}} \left\{ T^*(z_1) S(z_1) e^{i\alpha} - (\omega - \sqrt{\omega^2+1}) I_0(z_1) \right\} \quad (C.15)$$

Onder weglating van enige herschrijvingen en herleidingen volgt uit (C.12) t/m (C.15):

$$D_0^{(1)} D_0^{(1)*} + D_0^{(2)} D_0^{(2)*} = \frac{1}{2(\omega^2+1)} \left\{ I_g(z_1) + (2\omega^2+1) I_0(z_1) - \omega S(z_1) T^*(z_1) e^{i\alpha} + T(z_1) S(z_1) e^{-i\alpha} \right\} \quad (C.16)$$

We vervolgen de berekening nu met de derde term van het rechterlid van (C.11):

$$D_0^{(1)} D_0^{(2)*} e^{2\pi i \phi(z_1+z_2)} = D_0^{(1)} \left\{ T^*(z_1) - D_0^{(1)*} \right\} e^{-2\pi i \phi z_1} e^{2\pi i \phi(z_1+z_2)} \\ = D_0^{(1)} T^*(z_1) e^{2\pi i \phi z_2} - D_0^{(1)} D_0^{(1)*} e^{2\pi i \phi z_2} \quad (C.17)$$

$$= \frac{1}{4(\omega^2+1)} \left\{ S(z_1) T^*(z_1) (\omega + \sqrt{\omega^2+1}) e^{i\alpha} - I_g(z_1) + I_0(z_1) + T(z_1) S^*(z_1) e^{-i\alpha} \right\} e^{2\pi i \phi z_2} \quad (C.18)$$

Waarbij gebruik is gemaakt van (C.12) en (C.15)

Uit (C.18) volgt onmiddellijk de vierde term van het rechterlid van (C.11):

$$D_0^{(1)*} D_0^{(2)} e^{-2\pi i \sigma(z_1+z_2)} = \frac{1}{4(\omega^2+1)} \left\{ S^*(z_1) T(z_1) (\omega + \sqrt{\omega^2+1}) e^{-i\alpha} - I_g(z_1) - I_0(z_1) + \right. \\ \left. + T^*(z_1) S(z_1) (\omega - \sqrt{\omega^2+1}) e^{i\alpha} \right\} e^{-2\pi i \sigma z_2} \quad (C.19)$$

Uit (C.18) en (C.19) volgt:

$$D_0^{(1)} D_0^{(2)*} e^{2\pi i \sigma(z_1+z_2)} + D_0^{(1)*} D_0^{(2)} e^{-2\pi i \sigma(z_1+z_2)} = \\ = \frac{1}{4(\omega^2+1)} \left\{ T(z_1) S^*(z_1) e^{-i\alpha} \left[(\omega - \sqrt{\omega^2+1}) e^{2\pi i \sigma z_2} + (\omega + \sqrt{\omega^2+1}) e^{-2\pi i \sigma z_2} \right] + \right. \\ \left. + T^*(z_1) S(z_1) e^{i\alpha} \left[(\omega + \sqrt{\omega^2+1}) e^{2\pi i \sigma z_2} + (\omega - \sqrt{\omega^2+1}) e^{-2\pi i \sigma z_2} \right] + \right. \\ \left. + 2 [I_0(z_1) - I_g(z_1)] \cos 2\pi \sigma z_2 \right\} \quad (C.20)$$

Berekenen wij vervolgens $T(z_1) S^*(z_1)$ en $S(z_1) T^*(z_1)$:

$$T^*(z_1) S(z_1) = \left\{ C_0^{(1)} e^{-2\pi i t z_1} + C_0^{(2)} e^{-2\pi i (t-\sigma) z_1} \right\} \left\{ C_g^{(1)} e^{2\pi i (t-\sigma) z_1} + C_g^{(2)} e^{2\pi i (t-\sigma-\sigma) z_1} \right\} \\ = \left\{ C_0^{(1)} C_g^{(1)} + C_0^{(2)} C_g^{(2)} + C_0^{(1)} C_g^{(2)} e^{-2\pi i \sigma z_1} + C_0^{(2)} C_g^{(1)} e^{2\pi i \sigma z_1} \right\} e^{-2\pi i \sigma z_1} \quad (C.21)$$

Met de betrekkingen (B.19) van appendix B volgt:

$$T^*(z_1) S(z_1) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \sigma z_1 + i\sqrt{\omega^2+1} \sin 2\pi \sigma z_1}{2(\omega^2+1)} e^{-2\pi i \sigma z_1} \quad (C.22)$$

En uit (C.22) volgt onmiddellijk:

$$T(z_1) S^*(z_1) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \sigma z_1 - i\sqrt{\omega^2+1} \sin 2\pi \sigma z_1}{2(\omega^2+1)} e^{+2\pi i \sigma z_1} \quad (C.23)$$

Nu is $I_0(z_1 + z_2)$ = rechterlid van (C.16) + rechterlid van (C.20)

We willen $I_0(z_1 + z_2)$ nu schrijven als:

$$I_0(z_1 + z_2) = P + Q e^{i\alpha} + R e^{-i\alpha} \quad (C.24)$$

Uit (C.16) en (C.20) volgt, dat:

$$Q = \frac{1}{2(\omega^2 + 1)} T^*(z_1) S(z_1) \left\{ -\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_2 + i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_2 \right\} \quad (C.25)$$

$$\text{en } R = \frac{1}{2(\omega^2 + 1)} T(z_1) S^*(z_1) \left\{ -\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_2 - i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_2 \right\} \quad (C.26)$$

Nu volgt uit (C.8a) en (C.8b):

$$T^*(z_1) S(z_1) = \psi_0^*(z_1) \psi_g(z_1) e^{2\pi i \theta z_1} \quad (C.27)$$

$$T(z_1) S^*(z_1) = \psi_0(z_1) \psi_g^*(z_1) e^{-2\pi i \theta z_1} \quad (C.28)$$

(C.27) en (C.22) geven:

$$\psi_0^*(z_1) \psi_g(z_1) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_1 + i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_1}{2(\omega^2 + 1)} \quad (C.29)$$

(C.28) en (C.23) geven:

$$\psi_0(z_1) \psi_g^*(z_1) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_1 - i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_1}{2(\omega^2 + 1)} \quad (C.30)$$

Analoog definiëren we:

$$\psi_0^*(z_2) \psi_g(z_2) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_2 + i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_2}{2(\omega^2 + 1)} \quad (C.31)$$

$$\text{en } \psi_0(z_2) \psi_g^*(z_2) = \frac{-\omega + \omega \cos 2\pi \theta z_2 - i\sqrt{\omega^2 + 1} \sin 2\pi \theta z_2}{2(\omega^2 + 1)} \quad (C.32)$$

Hierin zijn $\psi_0(z_2)$ en $\psi_g(z_2)$ dus gedefinieerd als de amplituden van respectievelijk doorgaande- en gediffraeteerde bundel van een perfect kristal met dikte z_2 .

Uiteindelijk volgt dus:

$$I_0(z_1+z_2) = P + \psi_0^*(z_1)\psi_g(z_1)\psi_0^*(z_2)\psi_g(z_2)e^{i\alpha} + \psi_0(z_1)\psi_g^*(z_1)\psi_0(z_2)\psi_g^*(z_2)e^{-i\alpha} \quad (C.33)$$

of:

$$I_0(z_1+z_2) = P + \left\{ \psi_0^*(z_1)\psi_g(z_1)\psi_0^*(z_2)\psi_g(z_2) + \psi_0(z_1)\psi_g^*(z_1)\psi_0(z_2)\psi_g^*(z_2) \right\} \cos \alpha + i \left\{ \psi_0^*(z_1)\psi_g(z_1)\psi_0^*(z_2)\psi_g(z_2) - \psi_0(z_1)\psi_g^*(z_1)\psi_0(z_2)\psi_g^*(z_2) \right\} \sin \alpha \quad (C.34)$$

(C.34) wordt nu herleid tot:

$$I_0(z_1+z_2) = P + K \cos(\alpha - \alpha_0) \quad (C.35)$$

Uit (C.34) volgt:

$$K = 2 \left\{ I_0(z_1)I_g(z_1)I_0(z_2)I_g(z_2) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (C.36)$$

Resteert nog de berekening van P ; P is gelijk aan de som van alle van α onafhankelijke termen in (C.16) en (C.20)

$$P = \frac{1}{2(\omega^2+1)} \left\{ I_g(z_1) + (2\omega^2+1)I_0(z_1) + [I_0(z_1) - I_g(z_1)] \cos 2\pi \delta z_2 \right\} \quad (C.37)$$

Vergelijking (C.37) kan ook geschreven worden als:

$$P = I_0(z_1) \left\{ \frac{2\omega^2+1}{2(\omega^2+1)} + \frac{1}{2(\omega^2+1)} \cos 2\pi \delta z_2 \right\} + I_g(z_1) \left\{ \frac{1}{2(\omega^2+1)} - \frac{1}{2(\omega^2+1)} \cos 2\pi \delta z_2 \right\} \quad (C.38)$$

Vergelijken we nu de termen tussen de accolades in (C.38) met de uitdrukkingen voor I_0 en I_g voor het perfecte kristal (de vergelijkingen (B.23) en (B.25) van appendix B), dan volgt met de eerder gegeven definities voor $\psi_0(z_2)$ en $\psi_g(z_2)$:

$$P = I_0(z_1)I_0(z_2) + I_g(z_1)I_g(z_2) \quad (C.39)$$

Substitutie van (C.36) en (C.39) in (C.35) geeft:

$$I_0(z_1+z_2) = I_0(z_1)I_0(z_2) + I_g(z_1)I_g(z_2) + 2 \left\{ I_0(z_1)I_0(z_2)I_g(z_1)I_g(z_2) \right\}^{\frac{1}{2}} \times \cos(\alpha - \alpha_0) \quad (C.40)$$

Nu was $\alpha = -2\pi|\Delta g| \cdot z$

Met $M = |\Delta g|^{-1}$ volgt tenslotte:

$$I_0(z_1+z_2) = I_0(z_1)I_0(z_2) + I_g(z_1)I_g(z_2) + 2 \left\{ I_0(z_1)I_0(z_2)I_g(z_1)I_g(z_2) \right\}^{\frac{1}{2}} \cos 2\pi \left(\frac{z-z_0}{M} \right) \quad (C.41)$$

Uit (C.34) en (C.35) volgt met $\alpha_0 = \frac{-2\pi x}{M}$

$$\operatorname{tg} \frac{2\pi x_0}{M} = i \left[\frac{\psi_0^*(z_1)\psi_g(z_1)\psi_0^*(z_2)\psi_g(z_2) - \psi_0(z_1)\psi_g^*(z_1)\psi_0(z_2)\psi_g^*(z_2)}{\psi_0^*(z_1)\psi_g(z_1)\psi_0^*(z_2)\psi_g(z_2) - \psi_0(z_1)\psi_g^*(z_1)\psi_0(z_2)\psi_g^*(z_2)} \right] \quad (C.42)$$

(C.42) kan worden herleid tot:

$$\operatorname{tg} \frac{2\pi x_0}{M} = - \frac{\frac{w}{w^2+1} \sin \pi G(z_1+z_2)}{\cos \pi G(z_1+z_2) + \frac{1}{w^2+1} \sin \pi G z_1 \sin \pi G z_2} \quad (C.43)$$

Deze herleiding zullen we evenwel hier niet geven.

Appendix D

OPLOSSING VAN DE HOWIE-WHELAN-VERGELUKINGEN VOOR EEN

PERFECT KRISTAL, REKENING HOUDEND MET ANOMALE ABSORPTIE

Als rekening wordt gehouden met de anormale absorptie hebben de Howie-Whelanvergelijkingen voor het tweestraalsgeval de volgende gedaante:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\varphi_0}{dz} &= \pi i \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right) \varphi_0 + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right) \varphi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i g \cdot R) \\ \frac{d\varphi_g}{dz} &= \pi i \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right) \varphi_g + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right) \varphi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i g \cdot R) \end{aligned} \right\} \quad (D.1)$$

Wij beperken ons hier tot het perfecte kristal ($R=0$)

De oplossing van de vergelijkingen (D.1) is analoog aan de manier, waarop wij dit in appendix B deden.

De tweede-orde differentiaalvergelijking voor de doorgaande bundel is:

$$\frac{d^2\varphi_0}{dz^2} - 2\pi i \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} + s \right) \frac{d\varphi_0}{dz} - \pi^2 \left(\left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right)^2 - \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right)^2 + 2s \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right) \right) \varphi_0 = 0 \quad (D.2)$$

Als oplossing van (D.2) proberen we:

$$\varphi_0 = C_0 \exp(2\pi i \gamma_0 z)$$

Substitutie in (D.1) levert:

$$4\gamma_0^2 - 4\gamma_0 \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} + s \right) + \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right)^2 - \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi_g'} \right)^2 + 2s \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi_0'} \right) = 0 \quad (D.3)$$

Lit (D.3) volgen nu twee waarden voor γ_0 , die beide complex zijn. We stellen:

$$\gamma_0 = \gamma_{0R} + i\gamma_{0I} \quad (D.4)$$

We substitueren nu (D.4) in (D.3) en scheiden de ontstane vergelijking in een reëel en een imaginair deel, die elk afzonderlijk gelijk nul moeten zijn.

Voor de reële termen geldt:

$$4\gamma_{0R}^2 - 4q_0^2 - 4\left(\frac{1}{\xi_0} + s\right)\gamma_{0R} + \frac{4q_0}{\xi_0'} + \frac{1}{\xi_0'^2} - \frac{1}{\xi_0'^2} - \frac{1}{\xi_0'^2} + \frac{1}{\xi_0'^2} + \frac{2s}{\xi_0} = 0 \quad (D.5)$$

Nu zal blijken, dat q zeer klein is t.o.v γ ; en omdat $\frac{\xi_0}{\xi_0'}$ en $\frac{\xi_0'}{\xi_0}$ beide van de orde 0,1 zijn, kan (s) bij goede benadering worden geschreven als:

$$4\gamma_{0R}^2 - 4\left(\frac{1}{\xi_0} + s\right)\gamma_{0R} + \left(\frac{1}{\xi_0'^2} - \frac{1}{\xi_0'^2} + \frac{2s}{\xi_0}\right) = 0 \quad (D.6)$$

Vergelijking (D.6) is identiek met vergelijking (B.4) van appendix B

Er volgen twee waarden van γ_{0R} :

$$\gamma_{0R}^{(1)} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_0} + s\right) + \frac{1}{2}\sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} \quad (D.7)$$

$$\text{en } \gamma_{0R}^{(2)} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\xi_0} + s\right) - \frac{1}{2}\sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} \quad (D.8)$$

We zien dus, dat het reële gedeelte van γ niet beïnvloed wordt door de complexe extinctieafstanden, en dat de invloed van de anomale absorptie verdisconteerd kan worden door aan de uitdrukkingen voor γ , zoals die werden berekend bij verontachtzaming van de anomale absorptie, een imaginair deel toe te voegen.

Voor de imaginaire termen geldt:

$$8q_0\gamma_{0R} - 4\frac{\gamma_{0R}}{\xi_0'} - \frac{4q_0}{\xi_0} - 4q_0s + \frac{2}{\xi_0'\xi_0'} - \frac{2}{\xi_0'\xi_0'} + \frac{2s}{\xi_0'} = 0 \quad (D.9)$$

Substitueren we nu in (D.9) de waarden van f_{0R} uit (D.7) en (D.8) dan volgt:

$$q_{b_0}^{(1)} = \frac{1}{2\xi_0'} + \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \quad (D.10)$$

en $q_{b_0}^{(2)} = \frac{1}{2\xi_0'} - \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \quad (D.11)$

waarin $w = \xi_0' s$

Aangezien $f_g^{(1)} = f_0^{(1)} - s$ en $f_g^{(2)} = f_0^{(2)} - s$, met of zonder anomale absorptie (Zie hiervoor ook appendix B) is het eindresultaat van de berekeningen:

$$f_0^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} + s \right) + \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} + i \left\{ \frac{1}{2\xi_0'} + \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \right\} \quad (D.12a)$$

$$f_0^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} + s \right) - \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} + i \left\{ \frac{1}{2\xi_0'} - \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \right\} \quad (D.12b)$$

$$f_g^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} - s \right) + \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} + i \left\{ \frac{1}{2\xi_0'} + \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \right\} \quad (D.12c)$$

$$f_g^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\xi_0} - s \right) - \frac{1}{2} \sqrt{s^2 + \frac{1}{\xi_0'^2}} + i \left\{ \frac{1}{2\xi_0'} - \frac{1}{2\xi_0' \sqrt{w^2 + 1}} \right\} \quad (D.12d)$$

Nadere beschouwing van de vergelijkingen (D.12) leert, dat de invloed van ξ_0 en ξ_0' op beide Blochgolven dezelfde is. Deze grootheden zijn respectievelijk verantwoordelijk voor het brekingsindex effect en een gemiddelde absorptie.

Verder zien we, dat de invloed van de anomale absorptie op Blochgolf $b^{(1)}$ groter is, dan op Blochgolf $b^{(2)}$.

De amplituden van doorgaande - en gediffractioneerde bundel worden, voor het tweestralgeval respectievelijk gegeven door:

$$\Psi_0(z) = C_0^{(1)} \exp(2\pi i f_0^{(1)} z) + C_0^{(2)} \exp(2\pi i f_0^{(2)} z) \quad (D.13a)$$

$$\Psi_g(z) = C_g^{(1)} \exp(2\pi i f_g^{(1)} z) + C_g^{(2)} \exp(2\pi i f_g^{(2)} z) \quad (D.13b)$$

In de variant op de Darwinrepresentatie, die wij gewoon zijn te gebruiken (zie hiervoor appendix A) zijn de coëfficiënten $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$, $C_g^{(1)}$ en $C_g^{(2)}$ functies van de randvoorwaarden, die aan de bundel worden opgelegd bij het binnentreden van het kristal.

Men kan eenvoudig nagaan, dat het introduceren van een imaginair deel in de f 's met zich meebrengt, dat ook deze coëfficiënten een klein imaginair deel zullen gaan bevatten. Deze veranderingen worden echter in het algemeen verwaarloosd (Hirsch, Glz 207)

Met verwaarlozing van het imaginaire deel in de coëfficiënten, worden nu de intensiteiten van doorgaande - en gediffractioneerde bundel berekend.

Uit (D.13a), (B.19a) en (B.19b) uit appendix B volgt:

$$\Psi_0(z) = \frac{-w + \sqrt{w^2 + 1}}{2\sqrt{w^2 + 1}} e^{2\pi i f_0^{(1)} z} + \frac{+w + \sqrt{w^2 + 1}}{2\sqrt{w^2 + 1}} e^{2\pi i f_0^{(2)} z} \quad (D.14)$$

Met (D.12a), (D.12b), (B.20a) en (B.20b) uit appendix B volgt:

$$f_0^{(1)} = t + i(a+b) \quad (D.15a)$$

$$f_0^{(2)} = t - i(a-b) \quad (D.15b)$$

waarin $a = \frac{1}{2\Sigma'_0}$ en $b = \frac{1}{2\Sigma'_g \sqrt{w^2 + 1}}$

(D.15a), (D.15b) en (D.14) levert

$$\Psi_0(z) = e^{-2\pi i a z} e^{2\pi i t z} \left\{ \frac{-w + \sqrt{w^2 + 1}}{2\sqrt{w^2 + 1}} e^{-2\pi i b z} + \frac{+w + \sqrt{w^2 + 1}}{2\sqrt{w^2 + 1}} e^{-2\pi i b z} e^{2\pi i b z} \right\} \quad (D.16)$$

Nu volgt voor de intensiteit van de doorgaande bundel (I_0)

$$I_0(z) = \psi_0(z) \psi_0^*(z)$$

$$I_0(z) = \frac{e^{-4\pi a z}}{4(w^2+1)} \left\{ (2w^2+1) \left(e^{4\pi b z} + e^{-4\pi b z} \right) + 2w\sqrt{w^2+1} \left(e^{4\pi b z} - e^{-4\pi b z} \right) + 2\cos 2\pi G z \right\} \quad (\text{D.17})$$

Uit (D.13b), (B.19c) en (B.19d) uit appendix B volgt:

$$\psi_g(z) = \frac{1}{2\sqrt{w^2+1}} e^{2\pi i \gamma_g^{(1)} z} - \frac{1}{2\sqrt{w^2+1}} e^{2\pi i \gamma_g^{(2)} z} \quad (\text{D.18})$$

Met (D.12c), (D.12d), (B.20c) en (B.20d) uit appendix B volgt:

$$\gamma_g^{(1)} = t - s + i(a+b) \quad (\text{D.19a})$$

$$\gamma_g^{(2)} = t - G - s + i(a-b) \quad (\text{D.19b})$$

(D.19a), (D.19b) en (D.18) levert:

$$\psi_g(z) = \frac{e^{-2\pi a z} e^{2\pi i(t-s)z}}{2\sqrt{w^2+1}} \left\{ e^{-2\pi b z} - e^{+2\pi b z} - \frac{2\pi G z}{e} \right\} \quad (\text{D.20})$$

Nu volgt voor de intensiteit van de gediffracteerde bundel (I_g)

$$I_g(z) = \psi_g(z) \psi_g^*(z)$$

$$I_g(z) = \frac{e^{-4\pi a z}}{4(w^2+1)} \left\{ e^{4\pi b z} + e^{-4\pi b z} - 2\cos 2\pi G z \right\} \quad (\text{D.21})$$

- p. 17 Mth. wenz ✓
 - p. 13 "byndhuif"
 - p. 19 schroten bew. b. , mit peristole → flem yukt anstet.
 - p. 34 frond von der bewering?
 - p. 38 Eney. yantids positus (~ p. 40)
 - p. 49. Exp. sey ; waarom mit op (110) gendward?
 - p. 39 besomp gelusend ~ y. kin f
 - p. 57 de ^{luchfinter} → een f penideldelde
 - p. 53 blub sin ; he sty want zelf ; een. middel
- note: benijt dit model mit hendeen is
 hucht he guet (vaydelin)
 beste wort geyf v. onth

Meyer f. Rupt Ontmenplan : ook Marie-pakken?

Dt is 1500^o 15 km : woof^o

had n 400 R

Gehep

smore spand - f (overvoers) : niet pinnen
(pup zijn indertische!)

M pinnen mit dith. pinnen
pinnen zijn he poot.

