

X 射 綫 的 次 級 消 光*

陈 麓

提 要

本文考虑了嵌鑲晶体中经各级衍射的 X 射线的偏极化状态的变化,对次级消光效应作了较严密的处理。文中分别得出了透射线及多次衍射线功率的表达式以及有效线吸收系数。

一、引 言

最近, Zachariasen^[1] 指出,由 Darwin 所首創的次級消光理論沒有考虑到 X 射綫在晶体中发生衍射时偏极化状态的改变,因而 Darwin 的著名公式

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_0 + g_2 Q + \cdots \quad (1)$$

是不正确的,与实验結果不相符合。从这个見解出发, Zachariasen 更正了他于 1945 年間世的名著^[2]中的計算,提出了一个在理論上更正确的公式:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_0 + 2g_2 Q \frac{1 + \cos^4 2\theta}{(1 + \cos^2 2\theta)^2} + \cdots, \quad (2)$$

公式(2)和他的实验結果較為符合。

Zachariasen 关于必需考虑 X 射綫在晶体中发生衍射时偏极化状态改变的見解是正确的,也是很重要的。但我們认为計算还可以进行得更彻底一些。鉴于次級消光校正精确測定 $|F|^2$ 时(尤其是单晶体)的重要性,在本文中我們作了新的尝试。我們考虑了各次的衍射波,并采用了較严密的偏极化平均法。

二、基 本 方 程

和 Darwin 及 Zachariasen 一样,我們研究一个呈平行平板状的嵌鑲晶体,而且衍射条件是对称 Bragg 或对称 Laue 的。晶体中的每个嵌鑲块假設按理想嵌鑲块进行衍射。标志嵌鑲块的衍射面和整个晶体的平均衍射面(在 Bragg 衍射时平行于晶体板平面,而在 Laue 衍射时垂直于晶体板平面)的相对取向的分布函数 $W(\Delta)$ 的寬度假設远大于单个嵌鑲块的衍射角度范围。

上述情况下,晶体中元体积 δV 所衍射功率的期待值是(参見文献[1]或[2])

$$\delta P = I_0(\psi) W(\theta_B - \theta) Q_0 (\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\theta_B) \delta V, \quad (3)$$

其中 θ 为入射束和平均衍射面所成角度; θ_B 为和衍射晶面相应的 Bragg 角;

$$Q_0 = \left(\frac{e^2}{mc^2} NF \right)^2 \lambda^3 / \sin 2\theta_B; \quad (4)$$

* 1964 年 2 月 3 日收到。

N 为单位体积中的晶胞数; F 为结构因子.

需要十分注意的是: 代表入射线中 $\mathbf{E}$ 向量和 $\mathbf{k}_0 \times \mathbf{k}$ 间夹角的 ψ 每经一次衍射就有所变化, 即 $\psi \rightarrow \psi'$. 衍射理论给出:

$$\left. \begin{aligned} \cos^2 \psi' &= \cos^2 \psi / (\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\theta_B), \\ \sin^2 \psi' &= \sin^2 \psi \cos^2 2\theta_B / (\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\theta_B). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

因而, 我们有必要区分在入射波方向 $\mathbf{k}_0$ 前进的波的不同来源:

- (i) 经光电吸收(线吸收系数 μ_0)减弱的原始入射波, 其 $\psi = \psi_0$, 功率 $= T_0$;
- (ii) 经诸嵌镶块二次、四次或更多次衍射的波, 其 ψ 角分别为 $\psi_2, \psi_4, \dots$, 相应的功率以 T_{2n} 表示.

同理, 在衍射波方向, $\mathbf{k}$ 传播的波也有不同的来源:

- (i) 原始入射波经诸嵌镶块一次衍射的波, 其 $\psi = \psi_1$, 功率为 $\mathcal{D}_1$.
- (ii) 经诸嵌镶块三次、五次或更多次衍射的波, 其 ψ 角分别为 $\psi_3, \psi_5, \dots$. 功率以 $\mathcal{D}_{2n+1}$ 表示.

T_{2n} 随入射深度 ξ (沿入射方向计算) 的变化来自三个方面, 即: 由于光电吸收而导致的减弱, 由于诸嵌镶块衍射所引起的减弱, 以及由于 $\mathcal{D}_{2n-1}$ 波再次衍射所引起的加强. 于是

$$\left. \begin{aligned} \frac{dT_0}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_0]T_0, \\ \frac{dT_2}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_2]T_2 + \sigma_1\mathcal{D}_1, \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dT_{2n}}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_{2n}]T_{2n} + \sigma_{2n-1}\mathcal{D}_{2n-1}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

其中

$$\sigma_i = Q_0 W(\theta_B - \theta)(\cos^2 \psi_i + \sin^2 \psi_i \cos^2 2\theta_B). \quad (7)$$

对诸 $\mathcal{D}_{2n+1}$ 作同样的分析, 对于 Bragg 衍射, 就得到

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\mathcal{D}_1}{d\xi} &= [\mu_0 + \sigma_1]\mathcal{D}_1 - \sigma_0 T_0, \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{d\mathcal{D}_{2n+1}}{d\xi} &= [\mu_0 + \sigma_{2n+1}]\mathcal{D}_{2n+1} - \sigma_{2n} T_{2n}. \end{aligned} \right\} \quad (8a)$$

对于 Laue 衍射,

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\theta_1}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_1]\mathcal{D}_1 + \sigma_0 T_0, \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{d\mathcal{D}_{2n+1}}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_{2n+1}]\mathcal{D}_{2n+1} + \sigma_{2n} T_{2n}. \end{aligned} \right\} \quad (8b)$$

ψ_i 与 ψ_{i-1} 之间由(5)式相联系 ($\psi' = \psi_i$, $\psi = \psi_{i-1}$), 容易看出,

$$\psi_i < \psi_{i-1}, \quad (9)$$

换言之,每多經一次衍射的X射綫,就更趋近于所謂 σ 偏振态($\psi = 0$).

从(7)可得

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_{i-1}} - 1 = \cos^2 \psi_{i-1} \sin^2 \psi_{i-1} \sin^4 2\theta_B / (\cos^2 \psi_{i-1} + \sin^2 \psi_{i-1} \cos^2 2\theta_B)^2 > 0,$$

即

$$\sigma_i > \sigma_{i-1}. \quad (10)$$

(6)和(8)就是我們的基本方程組, 下一步就是在特定的边界条件下来解它. 需要指出的是在 Darwin 及 Zachariasen 的理論中, 出現于基本方程中的物理量是

$$T = \sum_{n=0}^{\infty} T_{2n}$$

及

$$\mathcal{D} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{D}_{2n+1}.$$

从(6)及(8)可以看到, 由于諸 σ_i 不同, 所以我們得不到只含 T 及 $\mathcal{D}$ 的微分方程.

在进行偏极化平均时, 如原始入射綫未偏极化, 則 ψ_0 在 ψ_0 与 $\psi_0 + d\psi_0$ 之間的几率为 $d\psi_0/2\pi$, 故

$$\overline{G(\psi_i)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} G(\psi_i) d\psi_0. \quad (11)$$

如入射綫是經過单色化的, 則未偏极化的是射到单色化晶体上的入射綫, 在进行偏极化平均时作相应的改变即可.

三、Bragg 衍射

在实用中最常遇到的是厚晶体, 即 $\mu_0 \xi_m \gg 1$. ξ_m 可視為 ∞ , 边界条件是

$$\xi = 0 \text{ 时, } T_0 = P_0, \quad T_{2n} = 0 (n = 1, 2, \dots);$$

$$\xi = \infty \text{ 时, } \mathcal{D}_{2n+1} = 0 (n = 0, 1, \dots).$$

解(6)及(8a)得

$$\left. \begin{aligned} T_0 &= P_0 \exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi], \\ \mathcal{D}_1 &= P_0 \sigma_0 \exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi] / (2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_1), \\ T_2 &= \frac{P_0 \sigma_0 \sigma_1}{(2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_1)(\sigma_2 - \sigma_0)} \{ \exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi] - \exp[-(\mu_0 + \sigma_2)\xi] \}, \\ \mathcal{D}_3 &= \frac{P_0 \sigma_0 \sigma_1 \sigma_2}{(2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_1)(\sigma_2 - \sigma_0)} \left\{ \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi]}{2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_3} - \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_2)\xi]}{2\mu_0 + \sigma_2 + \sigma_3} \right\}, \\ &\dots \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

在晶体上表面 $\xi = 0$,

$$\begin{aligned} T &= \sum_{n=0}^{\infty} T_{2n} = T_0 = P_0, \\ \mathcal{D} &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{D}_{2n+1} = \frac{P_0 \sigma_0}{(2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_1)} \left\{ 1 + \frac{\sigma_1 \sigma_2}{(2\mu_0 + \sigma_0 + \sigma_3)(2\mu_0 + \sigma_2 + \sigma_3)} + \dots \right\} = \\ &= \frac{P_0 \sigma_0}{2\mu_0} \left\{ 1 - \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{2\mu_0} + \frac{1}{4\mu_0^2} (\sigma_0 + \sigma_1)^2 + \frac{\sigma_1 \sigma_2}{4\mu_0^2} + O\left(\frac{\sigma^3}{\mu_0^3}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

在进行偏极化平均时,必需区别原始入射线未偏极化和原始入射线来自单色化晶体的情况.

(i) 原始入射线未偏极化

将 $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ 值代入并按(11)进行平均,得

$$\begin{aligned} \int \overline{\mathcal{D}}_{\xi=0} d\theta &= \frac{P_0 Q_0}{4\mu_0} (1 + \cos^2 2\theta_B) - \frac{P_0 Q_0^2 g_2}{4\mu_0^2} \left(\frac{7}{8} + \frac{1}{4} \cos^2 2\theta_B + \frac{7}{8} \cos^4 2\theta_B \right) + \\ &+ \frac{P_0 Q_0^3 g_3}{8\mu_0^3} \left(\frac{33}{16} - \frac{1}{16} |\cos 2\theta_B|^2 + |\cos 2\theta_B|^3 - \frac{1}{16} |\cos 2\theta_B|^4 + \frac{33}{16} |\cos 2\theta_B|^6 \right) + \\ &+ \dots, \end{aligned} \quad (14)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} g_1 &= 1, \\ g_m &= \int [W(\theta - \theta_B)]^m d\theta. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

按照X射线衍射理论,理想嵌镶块衍射中的 Q 因子是

$$Q = \frac{1}{2} Q_0 (1 + \cos^2 2\theta_B), \quad (16)$$

于是

$$\begin{aligned} \int \overline{\mathcal{D}}_{\xi=0} d\theta / \overline{T}_{\xi=0} &= \frac{Q}{2\mu_0} \left\{ 1 - 2g_2 \frac{Q}{\mu_0} \frac{\left(\frac{7}{8} + \frac{1}{4} \cos^2 2\theta_B + \frac{7}{8} \cos^4 2\theta_B \right)}{(1 + \cos^2 2\theta_B)^2} + \right. \\ &+ 2g_3 \frac{Q^2}{\mu_0^2} \frac{\left(\frac{33}{16} - \frac{1}{16} \cos^2 2\theta_B + |\cos 2\theta_B|^3 - \frac{1}{16} \cos^4 2\theta_B + \frac{33}{16} \cos^6 2\theta_B \right)}{(1 + \cos^2 2\theta_B)^3} + \dots \left. \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

故

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_0 + 2g_2 Q \frac{\left(\frac{7}{8} + \frac{1}{4} \cos^2 2\theta_B + \frac{7}{8} \cos^4 2\theta_B \right)}{(1 + \cos^2 2\theta_B)^2} + \dots. \quad (18)$$

Zachariasen 给出的(2)式的头两项比(18)式大 $\frac{1}{4} g_2 Q \frac{\sin^4 2\theta_B}{(1 + \cos^2 2\theta_B)^2}$,除了在 $2\theta_B = \pi/2$ 的附近以外,此差值并不大. Zachariasen 的基本方程是

$$\begin{aligned} \frac{dT}{d\xi} &= -[\mu_0 + \sigma_0]T + \sigma_1 \mathcal{D}, \\ \frac{d\mathcal{D}}{d\xi} &= [\mu_0 + \sigma_1]\mathcal{D} - \sigma_0 T. \end{aligned}$$

其精确解为

$$\begin{aligned} T_x &= P_0 \exp[-\alpha \xi], \\ \mathcal{D}_x &= P_0 \frac{\sigma_0}{\mu_0 + \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{2} + \sqrt{\left(\mu_0 + \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{2} \right)^2 - \sigma_0 \sigma_1}} \exp[-\alpha \xi], \end{aligned}$$

其中

$$\alpha = \frac{1}{2}(\sigma_0 - \sigma_1) + \sqrt{\left(\mu_0 + \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{2}\right)^2 - \sigma_0\sigma_1}.$$

在上表面,

$$\mathcal{D}_s = \frac{P_0\sigma_0}{2\mu_0} \left\{ 1 - \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{2\mu_0} + \frac{1}{4\mu_0^2}(\sigma_0 + \sigma_1)^2 + \frac{\sigma_0\sigma_1}{4\mu_0^2} + O\left(\frac{\sigma^3}{\mu_0^3}\right) \right\}. \quad (19)$$

比较(19)和(13),其差为 $\frac{P_0\sigma_0}{8\mu_0^3} \sigma_1(\sigma_0 - \sigma_2)$, 即和三次衍射波 D_3 同一数量级. 如果略去所有 $O\left(\frac{\sigma^3}{\mu_0^3}\right)$ 的项,则(13),(19)以及 Zachariasen 的结果都相同. 到 $\frac{Q^2}{\mu_0^2}$ 项为止[见公式(17)],我们的结果和 Zachariasen 的结果之所以不同,在于求偏极化平均的方法. 在 $\frac{Q^3}{\mu_0^3}$ 以上,则主要是因为 Zachariasen 没有分别考虑不同次的衍射线.

(ii) 原始入射线来自单色化晶体

在 $|F|^2$ 的实验测定中,更重要的是入射线来自单色化晶体的情况. 我们以 2α 代表单色化晶体的衍射角. J. E. White^[3] 曾经证明,经弹性变形的石英晶体的 $(10\bar{1}1)$ 面,当弯曲半径 $R < 500 \text{ m/m}$ 时,其衍射行为接近理想的嵌镶晶体. 所以我们将认为单色化晶体是理想嵌镶晶体,对情况(i)的计算仍旧适用,只是 P_0 不能作为常数,而必需令

$$P_0 = A(\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha), \quad (20)$$

此处 ψ 是入射到单色化晶体上的未偏极化射线的 ψ 角,而

$$\cos^2 \psi_0 = \cos^2 \psi / (\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha). \quad (21)$$

(11)式改为

$$\overline{G(\psi_i)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} G(\psi_i) d\psi, \quad (11')$$

自变量是 ψ 角而不是 ψ_0 ,这点很重要.

结果有(其中间结果见附录二)

$$\begin{aligned} \int \bar{D}_{\xi=0} d\theta &= \frac{AQ_0}{4\mu_0} (1 + \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B) - \\ &- \frac{AQ_0^2 g_2}{4\mu_0^2} \left\{ \frac{1}{2} + \cos^2 2\theta_B + \frac{1}{2} \cos 4\alpha \cos^4 2\theta_B + \frac{1}{2} \frac{\sin^4 2\theta_B [1 + 2|\cos 2\alpha|]}{[1 + |\cos 2\alpha|]^2} \right\} + \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (22)$$

及

$$\bar{T}_{\xi=0} = \frac{A}{2} (1 + \cos^2 2\alpha). \quad (23)$$

因 $Q_M = Q_0 \left(\frac{1 + \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B}{1 + \cos^2 2\alpha} \right)$ 是这时的 Q 因子,故

$$\begin{aligned} \int \bar{\mathcal{D}}_{\xi=0} d\theta / \bar{T}_{\xi=0} &= \frac{Q_M}{2\mu_0} \left\{ 1 - \frac{g_2 Q_M (1 + \cos^2 2\alpha)}{\mu_0 (1 + \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B)^2} \times \right. \\ &\times \left. \left[\frac{1}{2} + \cos^2 2\theta_B + \frac{1}{2} \cos 4\alpha \cos^4 2\theta_B + \frac{1}{2} \frac{\sin^4 2\theta_B [1 + 2|\cos 2\alpha|]}{[1 + |\cos 2\alpha|]^2} \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

容易验证,在 $\alpha = 0$ 时,(24)和(17)一致.

$$\begin{aligned} \mu_{\text{eff}} = & \mu_0 + g_2 Q_M \frac{(1 + \cos^2 2\alpha)}{(1 + \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B)^2} \left\{ \left[1 - \frac{|\cos 2\alpha|^2}{2(1 + |\cos 2\alpha|^2)} \right] + \right. \\ & + \frac{|\cos 2\alpha|^2}{(1 + |\cos 2\alpha|^2)^2} \cos^2 2\theta_B + \cos^2 2\alpha \left[1 - \frac{1}{2(1 + |\cos 2\alpha|^2)} \right] \cos^4 2\theta_B \Big\} + \\ & + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

因为当 $\theta_B = 0$ 或 $\theta_B = \pi/2$ 时, 不論有无单色化晶体, 所有的 σ_i 都等于 $Q_0 W(\theta - \theta_B)$, 所以 μ_{eff} 必然和 Darwin 的 $\mu_0 + g_2 Q$ 相同. (18) 及 (25) 式是和这一事实相符合的.

(25) 式中 $g_2 Q_M$ 的系数簡表見附录四.

四、Laue 衍射

Laue 衍射时的边界条件为

$$\xi = 0 \text{ 时, } T_0 = P_0; T_{2n} = 0 \quad (n = 1, 2, \dots),$$

$$\mathcal{D}_1 = 0; \mathcal{D}_{2n+1} = 0 \quad (n = 1, 2, \dots).$$

解(6)及(8b), 得

$$\left. \begin{aligned} T_0 &= P_0 \exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi], \\ \mathcal{D}_1 &= \frac{P_0 \sigma_0}{\sigma_1 - \sigma_0} \{ \exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi] - \exp[-(\mu_0 + \sigma_1)\xi] \}, \\ T_2 &= P_0 \sigma_0 \sigma_1 \left\{ \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_0)\xi]}{(\sigma_1 - \sigma_0)(\sigma_2 - \sigma_0)} + \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_1)\xi]}{(\sigma_2 - \sigma_1)(\sigma_0 - \sigma_1)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_2)\xi]}{(\sigma_0 - \sigma_2)(\sigma_1 - \sigma_2)} \right\}, \\ \mathcal{D}_3 &= P_0 \sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 \left\{ \sum_{i=0}^3 \frac{\exp[-(\mu_0 + \sigma_i)\xi]}{\prod_{j \neq i} (\sigma_j - \sigma_i)} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

其他任何 T_{2n} 及 $\mathcal{D}_{2n+1}$ 都可按照(26)所揭示的規律写出. 在下面, 我們只討論晶体片的厚度 ξ_m 满足 $\sigma_i \xi_m \ll 1$ 时的情况.

在出射面 $\xi = \xi_m$, 将指数函数展开, 有

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{D}_1 &= P_0 \sigma_0 \exp(-\mu_0 \xi_m) \xi_m \left\{ 1 - \frac{1}{2} (\sigma_0 + \sigma_1) \xi_m + \frac{1}{6} (\sigma_0^2 + \sigma_0 \sigma_1 + \sigma_1^2) \xi_m^2 + \dots \right\}, \\ T_2 &= P_0 \sigma_0 \sigma_1 \exp(-\mu_0 \xi_m) \frac{1}{2} \xi_m^2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} (\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2) \xi_m + \dots \right\}, \\ \mathcal{D}_3 &= P_0 \sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 \exp(-\mu_0 \xi_m) \frac{1}{6} \xi_m^3 \left\{ 1 - \frac{1}{4} (\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \xi_m + \dots \right\}, \\ &\dots \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

完全可以証明, T_{2n} 的展开式是(見附录三)

$$\begin{aligned} T_{2n} = & P_0 \sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{2n-1} \exp(-\mu_0 \xi_m) \frac{1}{(2n)!} \xi_m^{2n} \left\{ 1 - \frac{1}{2n+1} (\sigma_0 + \dots + \sigma_{2n}) \xi_m + \right. \\ & + \frac{1}{(2n+1)(2n+2)} [(\sigma_0^2 + \sigma_1^2 + \dots + \sigma_{2n}^2) + (\sigma_0 \sigma_1 + \sigma_0 \sigma_2 + \dots + \\ & \left. + \sigma_{2n-1} \sigma_{2n})] \xi_m^2 + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

$\mathcal{D}_{2n+1}$ 的展开式同(28), 只要用 $2n+1$ 代替 $2n$ 就得.

从(27)得

$$\mathcal{D}_{\xi=\xi_m} = P_0 \exp(-\mu_0 \xi_m) \left\{ \sigma_0 \xi_m - \frac{1}{2} \sigma_0 (\sigma_0 + \sigma_1) \xi_m^2 + \dots \right\}. \quad (29)$$

在入射线未偏极化的情况下,

$$\begin{aligned} \int \overline{\mathcal{D}_{\xi=\xi_m}} d\theta / \overline{T_{\xi=0}} &= Q \xi_m \exp(-\mu_0 \xi_m) \times \\ &\times \left\{ 1 - 2g_2 \xi_m Q \frac{\left(\frac{7}{8} + \frac{1}{4} \cos^2 2\theta_B + \frac{7}{8} \cos^4 2\theta_B \right)}{(1 + \cos^2 2\theta_B)^2} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

附 录 一

原始入射线未偏极化时的若干中间结果:

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_0} &= Q_0 W(\theta - \theta_B) \overline{(\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^2 2\theta_B)} = \frac{1}{2} Q_0 W(\theta - \theta_B) (1 + \cos^2 2\theta_B), \\ \overline{\sigma_0^2} &= Q_0^2 W^2(\theta - \theta_B) \overline{(\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^2 2\theta_B)^2} = \\ &= Q_0^2 W^2(\theta - \theta_B) \left(\frac{3}{8} + \frac{1}{4} \cos^2 2\theta_B + \frac{3}{8} \cos^4 2\theta_B \right), \\ \overline{\sigma_0 \sigma_1} &= Q_0^2 W^2(\theta - \theta_B) \overline{(\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^4 2\theta_B)} = \frac{1}{2} Q_0^2 W^2(\theta - \theta_B) (1 + \cos^4 2\theta_B), \\ \overline{\sigma_0^3} &= Q_0^3 W^3(\theta - \theta_B) \left(\frac{5}{16} + \frac{3}{16} \cos^2 2\theta_B + \frac{3}{16} \cos^4 2\theta_B + \frac{5}{16} \cos^6 2\theta_B \right), \\ \overline{\sigma_0^2 \sigma_1} &= Q_0^3 W^3(\theta - \theta_B) \left(\frac{3}{8} + \frac{1}{8} \cos^2 2\theta_B + \frac{1}{8} \cos^4 2\theta_B + \frac{3}{8} \cos^6 2\theta_B \right), \\ \overline{\sigma_0 \sigma_1^2} &= Q_0^3 W^3(\theta - \theta_B) \left[\frac{(\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^4 2\theta_B)^2}{(\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^2 2\theta_B)} \right] = \\ &= Q_0^3 W^3(\theta - \theta_B) \left\{ \frac{1}{2} \sin^4 2\theta_B (1 + \cos^2 2\theta_B) + |\cos 2\theta_B|^3 \right\}, \\ \overline{\sigma_0 \sigma_1 \sigma_2} &= \frac{1}{2} Q_0^3 W^3(\theta - \theta_B) (1 + \cos^6 2\theta_B). \end{aligned}$$

附 录 二

入射线来自单色化晶体时的若干中间结果:

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= Q_0 W(\theta - \theta_B) (\cos^2 \psi_0 + \sin^2 \psi_0 \cos^2 2\theta_B) = \\ &= Q_0 W(\theta - \theta_B) \left(\frac{\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B}{\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha} \right), \\ \sigma_i &= Q_0 W(\theta - \theta_B) \left(\frac{\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha \cos^{2i+2} 2\theta_B}{\cos^2 \psi + \sin^2 \psi \cos^2 2\alpha \cos^{2i} 2\theta_B} \right), \\ \overline{P_0 \sigma_0} &= A Q_0 W(\theta - \theta_B) \frac{1}{2} (1 + \cos^2 2\alpha \cos^2 2\theta_B), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\overline{P_0\sigma_0\sigma_1} &= A Q_0^2 W^2 (\theta - \theta_B) \cdot \frac{1}{2} (1 + \cos^2 2\alpha \cos^4 2\theta_B), \\ \overline{P_0\sigma_0^2} &= A Q_0^2 W^2 (\theta - \theta_B) \left\{ \cos^2 2\theta_B - \frac{1}{2} \sin^2 2\alpha \cos^4 2\theta_B + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sin^4 2\theta_B \frac{1 + 2|\cos 2\alpha|}{(1 + |\cos 2\alpha|)^2} \right\}.\end{aligned}$$

附 录 三

在 Laue 情况下我們要計算的典型和是

$$S_m^{(n)} = \sum_{i=0}^m \frac{\sigma_i^n}{\prod_{j \neq i} (\sigma_j - \sigma_i)} \quad (n \text{ 整数, 諸 } \sigma_i \text{ 不等}).$$

令

$$M(x) \equiv \prod_{i=0}^m (x - \sigma_i),$$

則

$$M'(\sigma_i) = (-1)^m \prod_{j \neq i} (\sigma_j - \sigma_i),$$

故

$$S_m^{(n)} = (-1)^m \sum_{i=0}^m \frac{\sigma_i^n}{M'(\sigma_i)} = (-1)^m \cdot \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{z^n dz}{M(z)}.$$

C 是个半径足够大、包含了 $M(z) = 0$ 所有的根的圓。我們令 C 无限向外扩张, 則

(i) 在 $n < m$ 时,

$$\oint \frac{z^n dz}{M(z)} = 0;$$

(ii) 在 $n = m$ 时,

$$\oint \frac{z^m dz}{M(z)} = \oint \frac{dz}{z} = 2\pi i;$$

(iii) 在 $n > m$ 时, 则需要作具体的計算。在 $n = m + 1$ 时,

$$\oint \frac{z^{m+1} dz}{z^{m+1} + a_1 z^m + a_2 z^{m-1} + \dots} = \oint \left(1 - \frac{a_1 z^m + a_2 z^{m-1} + \dots}{M(z)} \right) dz = -2\pi a_1 i.$$

同理得

$$\oint \frac{z^{m+2} dz}{M(z)} = 2\pi i (a_1^2 - a_2).$$

有了以上結果, (28) 式的証明就容易了。

附 录 四

由于 $2\theta_B$ 和 $\pi - 2\theta_B$ 的結果相同, 所以表中只列出 $2\theta_B \leq 90^\circ$ 的情况。在通常应用时, α 角都不大, 因此我們只算了 $\alpha = 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ, 15^\circ, 20^\circ$ 等几种情况。 k 值随 α 角的增加而减小, 当 $\alpha = 45^\circ$ 时 k 值恆为 1。

表 $\mu_{\text{eff}} = \mu_0 + k_{g2}Q_M$ 中 k 值简表

$\alpha \backslash 2\theta_B$	0°	30°	45°	60°	75°	90°
0°	1.000	1.015	1.083	1.270	1.574	1.750
5°	1.000	1.015	1.082	1.265	1.558	1.727
10°	1.000	1.015	1.080	1.250	1.514	1.662
15°	1.000	1.014	1.074	1.224	1.443	1.562
20°	1.000	1.013	1.065	1.187	1.353	1.438
45°	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

参 考 文 献

- [1] Zachariasen, W. H., *Acta Cryst.*, **16** (1963), 1139.
 [2] Zachariasen, W. H., *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*.
 [3] White, J. E., *J. Appl. Phys.*, **21** (1950), 855.

ON THE SECONDARY EXTINCTION OF X-RAYS

CHEN CHI

ABSTRACT

Account is taken of the change in the state of polarization of multiply diffracted X-rays in mosaic crystals, and a more rigorous treatment of secondary extinction is given. Separate expressions for the transmitted, and multiply diffracted power are obtained, which enable the effective absorption coefficient to be calculated.