

锌的 X 射线热漫散衍射及弹性系数*

吴德昌 王仁井†
(中国科学院)

提 要

提出使用逐步逼近方法进行 X 射线热漫散衍射强度的水平与垂直发散修正。从测量的热漫散衍射强度经过各种修正之后,得到锌的弹性系数与超声方法得到的结果相符,分别为(以 10^{12} 达因/厘米²为单位): $c_{11} = 1.69$, $c_{12} = 0.394$, $c_{13} = 0.549$, $c_{33} = 0.682$, $c_{44} = 0.429$, $c_{66} = \left(\frac{1}{2}c_{11} - \frac{1}{2}c_{12}\right) = 0.648$ 。

一、引 言

由测量晶体的 X 射线热漫散衍射强度测定弹性系数的方法已由 Wooster^[1] 等人做了许多工作,并得到了铅、金刚石、锗、氟化锂、白锡等晶体的弹性系数。但是我们觉得,在以前的工作中,修正漫散衍射强度实验值的发散效应的方法不够严格,实验工作量也很大,因而使用逐步逼近方法代替 Wooster^[1,2] 的方法进行这种修正。应用于锌单晶测量结果表明,这个方法是有效的。

锌的弹性常数早期曾有许多研究^[3], 1958 年 Alers & Neighbours^[4] 等人用超声方法重测,这些结果之间分歧较大。Joynson^[6] 在 1954 年用 X 射线漫散衍射方法测量了锌单晶的弹性谱,计算了六个力常数,由这些力常数推算的弹性系数 c_{ij} (不能由力常数得到 c_{33}) 与 Tyndall^[3] 的结果相近。我们测得的全部 c_{ij} 值则与[4]的结果相符。

二、弹性系数与热漫散衍射强度的关系

晶体对 X 射线产生的第一级热漫散衍射的强度与晶体的弹性系数直接有关,具体表达式如下^[1]:

$$D_1(\mathbf{H}^*) = |F_T|^2 \frac{kT}{\tau} \frac{H^{*2}}{K^{*2}} K(f)_g. \quad (1)$$

式中 F_T 为测量温度下 ($T^\circ\text{K}$) 晶体的结构因子; k 为玻耳兹曼常数; τ 为单胞体积; $|\mathbf{H}^*|$ 表示倒易空间中从原点 O 到测量点 A 的距离; $|\mathbf{K}^*| = \frac{1}{\Lambda}$ 为 A 点到最近邻一个倒易阵点 P 的距离, P 点的位矢为 $\mathbf{R}^*$,它在正交坐标系中的方向余弦记为 g_i ($i = 1, 2, 3$), 正交坐标系的 X, Y, Z 轴分别与 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[01\bar{1}0]$ 、 $[0001]$ 方向重合(见图 1); Λ 代表弹性波波长;

* 1965 年 7 月 19 日收到。

† 武汉大学物理系在中国科学院代培教师。

$$K(f)_g = g_i g_k (A^{-1})_{ik}, \quad (2)$$

$f_l (= f_i, l = 1, 2, 3)$ 表示方向 $\mathbf{K}^*$ (以下称为倒易线) 在正交坐标中的方向余弦; $(A^{-1})_{ik}$ 为 $(A)_{ik}$ 矩阵的逆矩阵, 而矩阵元素

$$A_{ik} = c_{ilmk} f_l f_m \quad (l, m = 1, 2, 3)^{1)}, \quad (3)$$

可见, $K(f)_g$ 是弹性系数 c_{ilmk} 及方向余弦 f_l, g_i 的函数. 图 1 给出锌的倒易阵点与正交坐标系的关系, A 为待测点, P 为其最近邻倒易阵点. 在这一特殊情况下, $\mathbf{R}^*$ 的方向余弦 g_i 是 $1, 0, 0$, $\mathbf{K}^*$ 的方向余弦 f_i 是 $0, 1, 0$, 故 $K(f)_g$ 记为 $K(010)_{100}$. 应当指出, 这里的 010 及 100 代表方向余弦, 并非晶面及晶向指数, 在本文中后者均采用四个指数的 Miller-Bravais 表达式. 对于一般的方向, $K(f)_g$ 的表式甚为冗长, 但对某些特殊方向则有比较简单的关系. 表 1 列出了锌晶体的 $K(f)_g$ 与弹性系数间的关系式. 由式(1)及表 1 可知, 对应于特定

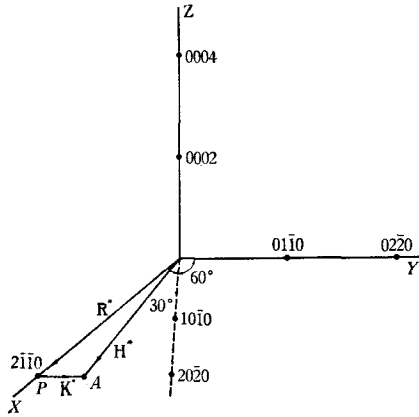


图 1 锌的倒易阵点与正交坐标系 (XYZ) 的关系

点 P 为 $2\bar{1}10$ 倒易阵点, A 为待测点.

方向, $D_1(\mathbf{H}^*)$ 正比于 $1/K^{*2}$. 如以 $D_1(\mathbf{H}^*)$ 值对 $1/K^{*2}$ 作图(如图 4), 则由这些直线的斜率可求得 $K(f)_g$, 从而得出 c_{ij} 的值.

表 1 锌晶体的 $K(f)_g$ 与 c_{ij} 的关系式

$\mathbf{R}^*$ 的方向余弦 ($g_1 g_2 g_3$)	100 (即 $[2\bar{1}10]$)	001 (即 $[0001]$)
$\mathbf{K}^*$ 的方向余弦 ($f_1 f_2 f_3$)		
100	$1/c_{11}$	
010	$2/(c_{11} - c_{12})$	$1/c_{44}$
$1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2} \ 0$	$(c_{11} + c_{66})/2c_{11}c_{66}$	
001	$1/c_{44}$	$1/c_{33}$
$1/\sqrt{2} \ 0 \ 1/\sqrt{2}$	$2(c_{33} + c_{44})/[c_{11}(c_{33} + c_{44}) + c_{33}c_{44} - 2c_{13}c_{44} - c_{13}^2]$	
$0 \ 1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2}$	$2(c_{11} + c_{44})/[c_{11}(c_{33} + c_{44}) + c_{33}c_{44} - 2c_{13}c_{44} - c_{13}^2]$	

表 2 $K(f)_g$ 比值与弹性系数比值 x_{ij} 的关系式

$g_1 g_2 g_3$	100	001
$K(f)_g$ 的比值		
$K(010)_{100}/K(100)_{100}$	$2/(1 - x_{12})$	
$K(1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2} \ 0)_{100}/K(100)_{100}$	$(3 - x_{12})/2(1 - x_{12})$	
$K(001)_{100}/K(100)_{100}$	$1/x_{44}$	
$K(1/\sqrt{2} \ 0 \ 1/\sqrt{2})_{100}/K(100)_{100}$	$2(x_{33} + x_{44})/(x_{33} + x_{44} + x_{33}x_{44} - 2x_{13}x_{44} - x_{13}^2)$	
$K(010)_{001}/K(001)_{001}$		x_{33}/x_{44}
$K(01/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2})_{001}/K(001)_{001}$		$2x_{33}(1 + x_{44})/(x_{33} + x_{44} + x_{33}x_{44} - 2x_{13}x_{44} - x_{13}^2)$

1) c_{ilmk} 与 c_{ij} 的关系即为熟知的指标变换, 如 $c_{1111} = c_{11}$, $c_{1211} = c_{61} = c_{16}$ 等等.

实验上, 通常为了消除 $|\mathbf{H}^*|$ 、极化系数及 $|F_T|^2$ 因子等随 $|\mathbf{K}^*|$ 而有微小变化的影响, 总是成对地测量 $\mathbf{K}^*$ 与 $-\mathbf{K}^*$ 处的漫散衍射强度, 并求它们的平均值。同时, 为避免由于多次绝对化增加误差, 引进弹性常数比 $x_{ij} = c_{ij}/c_{11}$, 相应地, $K(f)_g$ 值也取其对某一方向(例如 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 方向, g_i 分别为 1, 0, 0)的值之比, 如表 2。如此可由诸 $K(f)_g$ 比值求出 x_{ij} 值, 经 c_{11} 的绝对化求出 c_{ij} 的绝对值。

三、实验方法

1. 试样制备

锌单晶棒系用区域提纯方法生长, 纯度高于 99.99%。除在液态空气温度下解理成表面平行于(0001)面的晶片外, 并在室温下用电火花割截成表面平行于 $(2\bar{1}\bar{1}0)$ 面的晶片。随后将这二块晶片的断面用 40% 硝酸磨光, 以浸蚀掉表面加工应力较大的一层, 再经过在 280℃ 的温度下 20 小时退火处理, 以消除残存内应力, 最后为得到表面光洁的晶片, 用硝酸、酒精、双氧水配成(体积比 1:1:1)的抛光液进行化学抛光。劳埃照相检验表明, 斑点明锐, 但表面与原要求的晶面均差 1—2°。

2. 实验装置

测量是利用日本理学株式会社制的 D-3F 衍射仪进行的。为适应于单晶要求, 已在测角台上装配标准测角头, 并设法能使试样单独地转动到所需要的位置, 获得所需要的 i 角¹⁾(见图 2)。

采用铜辐射(点光源), 射线经过弯曲石英单色器单色化并聚焦在试样上。产生 X 光的条件为高压 30 千伏, 管流 15 毫安。考虑到 $\lambda/2$ 及高次谐波的影响很小, 没有进行修正。具体实验装置如图 2。

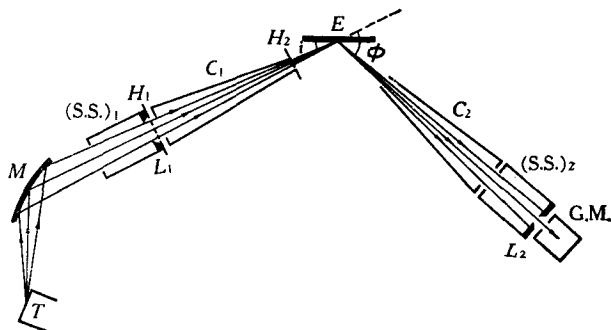


图 2 漫散衍射测量装置示意图

图中 T 为光源; M 为单色器; (S.S.)₁ 及 (S.S.)₂ 为一对 Soller

狭缝 (Soller Slit); C₁, C₂ 是一对准直管, 用以压低空气散射强度; E 为样品; L₁, L₂ 分别为限制入射线与衍射线的水平发散度的狭缝, 它们的宽度分别为 0.8 与 2.0 毫米, 相应的入射线与衍射线的水平发散度(分别称为 i 发散与 φ 发散)分别为 40' 及 45'; 与 L₁ 并插一起的 H₁ 及样品前面的 H₂ 是一对旨在限制入射线垂直方向高度的狭缝, 使入射光柱高度与试样高度相应, 狭缝高度分别为 4 毫米及 2.5 毫米; 由于用了二个 Soller 狭缝, 垂直方向的发散度(称为 ψ 发散)约为 4°; G. M. 为盖克计数管。

3. 热漫散衍射强度的测量

我们测量了表 2 所要求的所有倒易线上的热漫散衍射强度分布。

调节晶体取向使待测的倒易线处于测角台的赤道平面内, 并分别测出在测量漫散衍

1) 以下分别记试样表面与入射线间的夹角为 i 角及衍射线与入射线间的夹角为 φ 角, 并记试样表面相对于铅直轴倾斜的角度为 ψ 角。

射强度实验条件下这些倒易线所属的倒易阵点处的 i, φ, ψ 峯形(固定 φ 及 ψ 角而单独改变 i 角情形下测量的该斑点的布喇格反射的峯形状简称为 i 峯, 余类推)。分别以 $B_i(\delta), B_\varphi(\delta), B_\psi(\delta)$ 标示这些峯形函数, 这些函数在对实验漫散衍射强度进行发散校正时有用。

与测量的倒易点 A (图 1) 相应的 i, φ 角度数值可由 Wooster^[1] 描述的 i, φ 图读出或由简单的几何关系计算确定。

每次测量均以 10 分钟的总计数作为相对热漫散衍射强度的量度, 总计数在 240 到 2300 之间。对每一倒易点, 即每一 $|\mathbf{K}^*|$ 值, 重复测量 5 至 7 次, 以减小实验时的随机误差。

四、实验值的校正(逐步逼近法)

为求得纯粹由于倒易空间中某一点处第一级热漫散衍射贡献的强度 $D_1(\mathbf{H}^*)$, 须从实验值中扣除本底计数, 并进行吸收、白光、镶嵌、发散修正以及扣除二级热漫散衍射的贡献。除了发散修正外, 各项修正均采用了 Wooster^[1,2] 的方法。发散修正是所有这些修正中最重要的一项, 尤其是 ψ 发散修正(见表 4), 我们采用逐步逼近方法代替 Wooster^[2] 方法。

以下以 ψ 发散修正为例说明逐步逼近法的原理与步骤。

图 3 中, O 为倒易阵点阵原点, P 是倒易阵点, PA 为某一待测的倒易线, 平面 OPA 平行于测角台的赤道平面, A 为待测倒易点。由于垂直发散, 铅直线 $A'BAA''$ (垂直于平面 OPA) 上的每一点(例如 B 点)均对 A 点测量值有贡献, 其中 B 点的贡献以 $B_\psi(\delta)$ 为权重, $B_\psi(\delta)$ 即为 ψ 峯形函数, 它在

$\delta = 0$ 时有极大值, 随 $|\delta|$ 的增加而下降, 直到 $\delta = \pm \frac{\Delta}{2}$ 处降为 0。 Δ 相应于最大的垂直发散角度, 在本实验中约为 4° 。

在 A 点的一级热漫散衍射强度的实验测量值 $D'_1(\psi_0)$ (ψ_0 相应于 A 点的 ψ 角, 这里 δ 显然是零)与该点真正的一级热漫散衍射强度 $D_1(\psi_0)$ 的关系是^[1]

$$\left. \begin{aligned} \frac{D'_1(\psi_0)}{D_1(\psi_0)} &= 1 + Z_\psi = \frac{1}{d\psi}, \\ Z_\psi &= \frac{\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} z(\delta) B_\psi(\delta) d\delta}{\int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} B_\psi(\delta) d\delta}, \\ z(\delta) &= \frac{1}{2} \left[\frac{D_1(\psi_0 + \delta)}{D_1(\psi_0)} + \frac{D_1(\psi_0 - \delta)}{D_1(\psi_0)} \right] - 1, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$D_1(\psi_0 + \delta)$ 为 B 点(图 3)真正的一级热漫散衍射本领。 $z(\delta)$ 为距 A 点为 $|\delta|$ 处的一级热漫散衍射本领对 A 点的衍射本领的相对偏离。 Z_ψ 是在 $\delta = 0$ 处有垂直发散的一级热漫

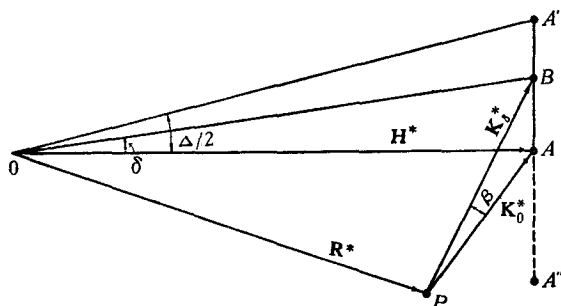


图 3 计算一级热漫散衍射实验强度的垂直 (ψ) 发散修正用的图示

散衍射强度实验值与真值的相对偏离。

Wooster 等^[1,2]实际测量各个 $(\phi_0 \pm \delta)$ 处 (δ 从 0 到 $\Delta/2$) 的漫散衍射强度 $D_1'(\phi_0 \pm \delta)$, 并以此代替(4)式中的 $D_1(\phi_0 \pm \delta)$ 以求得发散修正因子 $d\psi = \frac{1}{1 + Z_\psi}$. 这样作显然是不够严格的。此外为了得到 A 点的强度, 必须沿 $A'AA''$ 逐点进行漫散衍射强度测量, 实验工作量也就增加了几倍。我们采用逐步逼近法进行修正可以避免这些困难, 其步骤如下。

(1) 把各个倒易线上的实验强度数据, 进行吸收、白光、嵌镶修正后对 $1/K^{*2}$ 作图(如图4), 由这些直线的斜率求出零级近似的 $K(f)_g$ 比, 进而利用表 2 的关系式得到零级近似的 x_{ij} . 直线的截距代表与 $|\mathbf{K}^*|$ 无关的漫散强度贡献, 扣除这个值就是零级近似的第一级热漫散衍射强度。

(2) 由于在每一倒易阵点 P 附近的一级热漫散衍射本领 $D_1 \propto K(f)_g \times (1/K^{*2})$, 故

$$\frac{D_1(\phi_0 + \delta)}{D_1(\phi_0)} = \frac{K(f_\delta)_g}{K(f_0)_g} \cdot \frac{K_0^{*2}}{K_\delta^{*2}} \quad (5)$$

其中 $f_0, |\mathbf{K}_0^*|$ 分别为图 3 中 $\overrightarrow{PA}$ (发散角为 0 时) 的方向余弦与长度, f_δ 和 $|\mathbf{K}_\delta^*|$ 是 $\overrightarrow{PB}$ (发散角为 δ) 的相应值。由图 3 可知, 每一 δ 对应于一点 B 及一相应的 β , 由此可以求出与各 δ 相应的 $\overrightarrow{PB}$ 的 f_δ 和 K_δ^{*2} . 再利用零级近似的 x_{ij} 求出 $K(f)_g$, 再按(5)式算出零级近似的 $\frac{D_1(\phi_0 + \delta)}{D_1(\phi_0)}$, 代入(4)式即可求得零级近似的发散修正因子 $d\psi$.

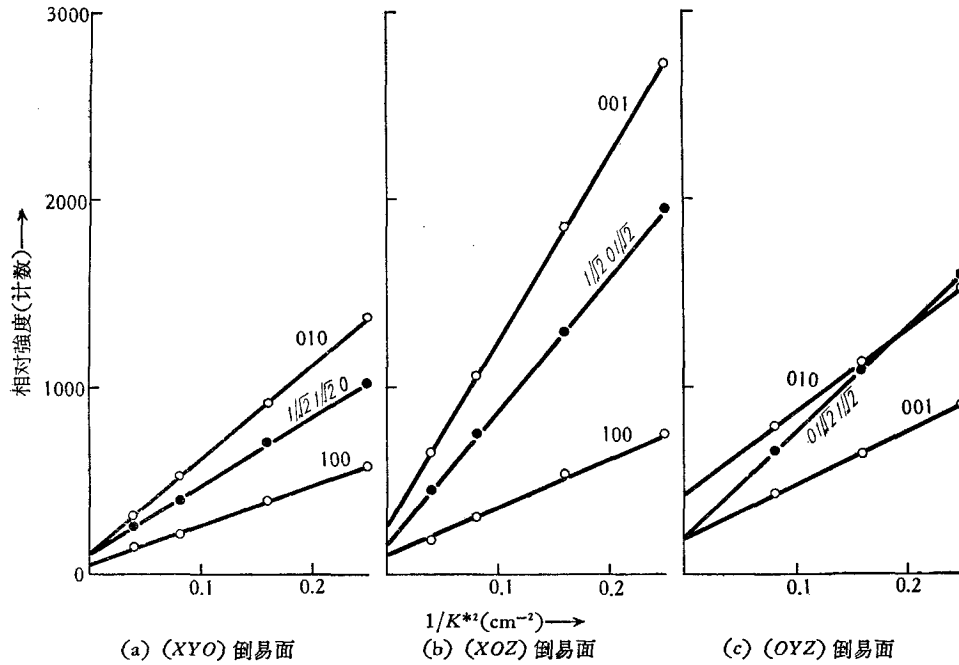
(3) 用 $d\psi$ 去乘零级近似的第一级热漫散强度, 再对 $1/K^{*2}$ 作图, 可得一级近似的 $K(f)_g$ 比值和 x_{ij} .

(4) 再用一级近似的 x_{ij} , 按步骤(2)求出一级近似的发散正因子 $d\psi$, 并且再用它去修正零级近似的第一级热漫散衍射强度。

如此反复进行, 直到 $d\psi$ 数值趋于一恒定值而不再变化时为止。实际上只须要反复二、三次就足够了, 很多是在一次近似之后 $d\psi$ 就达最终值, 进行高级近似计算时它们不再变更。由于 i, φ 发散修正量一般小于 2%, 只需要进行一次修正就够了。二级热漫散衍射的贡献一般也很小(在本实验的情况下不大于 1.5%), 因此它的修正可以利用任何级近似的弹性系数计算^[1]而无显著误差。

五、结果与讨论

利用表面平行于 $(2\bar{1}\bar{1}0)$ 晶面的试样测量 $2\bar{1}\bar{1}0$ 倒易阵点周围的若干倒易线上的漫散衍射强度, 利用表面平行于 (0001) 晶面的试样测量 0004 倒易阵点周围的若干倒易线上的漫散衍射强度(所要求的倒易线见表 2)。经过各种修正之后得到一级热漫散衍射强度的相对值(以 10 分钟的总计数作为相对强度的单位), 结果如图 4 所示。在这个图中, $|\mathbf{K}^*|$ 是以厘米作单位, 它的数值是相应于反射球半径为 50 厘米的情况而定的, 在这种情况下, $2\bar{1}\bar{1}0$ 倒易阵点的位矢长度 $|\mathbf{R}_{2\bar{1}\bar{1}0}^*| = 57.9$ 厘米, 0004 倒易阵点的位矢长度 $|\mathbf{R}_{0004}^*| = 62.3$ 厘米。必须指出, 由于吸收校正(修正因子为 $\frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sin i}{\sin(\varphi - i)} \right]$) 随 φ 角减小而

图4 实验测定的一级热漫散射的相对强度对 $1/K^2$ 作图

纵坐标表示 10 分钟的总计数；横坐标表示相应于反射球半径为 50 厘米情况下（在此情况下倒易阵点 2TiO 的位矢长度 $|\mathbf{R}_{110}^*| = 57.9$ 厘米， 0004 的位矢长度 $|\mathbf{R}_{004}^*| = 62.3$ 厘米），被测量的倒易点与最近邻倒易阵点间的距离平方的倒数（ cm^{-2} ）。直线的斜率正比于 $K(f)_g$ ，截距给出与 $|\mathbf{K}^*|$ 无关的漫散衍射强度背景。
 (a) 给出 $K(f)_g$ 的相对值分别为： $K(100)_{100} = 500$ ， $K(1/\sqrt{2} \ 0 \ 1/\sqrt{2})_{100} = 910$ ， $K(010)_{100} = 1270$ ；
 (b) 给出： $K(100)_{100} = 631$ ， $K(1/\sqrt{2} \ 0 \ 1/\sqrt{2})_{100} = 1779$ ， $K(001)_{100} = 2477$ ；(c) 给出： $K(001)_{001} = 707$ ， $K(010)_{001} = 1120$ ， $K(0 \ 1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2})_{001} = 1394$ 。

相对地增大的缘故，对于后一试样，选择了 0004 倒易阵点而不是 0002 。

由图 4 中各直线的斜率，我们可以按表 2 的关系式求出 x_{ij} ，结果为

$$x_{12} = 0.23_2, \quad x_{13} = 0.32_5, \quad x_{33} = 0.40_4, \quad x_{44} = 0.25_4.$$

压缩率 $\beta_{||}$ ， $\beta_{\perp}$ 与弹性系数间的关系式为^[8]

$$\beta_{||} = \frac{c_{11} + c_{12} - 2c_{13}}{c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2} = \frac{1 + x_{12} - 2x_{13}}{c_{11}[x_{33}(1 + x_{12}) - 2x_{13}^2]}, \quad (6)$$

$$\beta_{\perp} = \frac{c_{33} - c_{13}}{c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2} = \frac{x_{33} - x_{13}}{c_{11}[x_{33}(1 + x_{12}) - 2x_{13}^2]}. \quad (7)$$

利用已知的 $\beta_{||}$ 与 $\beta_{\perp}$ 和 x_{ij} 的实验值，我们可以分别由 (6)，(7) 二式求得 c_{11} 的绝对值；取其算术平均值，再用 x_{ij} 值可获得其余 c_{ij} 的绝对值。

压缩率 $\beta_{||}$ 与 $\beta_{\perp}$ 的数据，Alers 和 Neighbours (1958)^[4] 的结果为： $\beta_{||} = 13.29 \times 10^{-13}$ 厘米²/达因， $\beta_{\perp} = 1.48 \times 10^{-13}$ 厘米²/达因；而 Bridgman (1935)^[7] 的结果为： $\beta_{||} = 13.77 \times 10^{-13}$ 厘米²/达因， $\beta_{\perp} = 1.60 \times 10^{-13}$ 厘米²/达因，可以认为二者比较相近。我们这里采用了前一作者的数据，得到绝对的 c_{11} 的平均值为 1.69×10^{12} 达因/厘米²。

1) $\beta_{||}$ ， $\beta_{\perp}$ 分别代表平行于与垂直于六次轴的压缩率。

全部的 c_{ij} 绝对值列于表 3.

表 3 从 X 射线热漫散衍射求出的鋅晶体弹性系数绝对值 ($\times 10^{12}$ 达因/厘米²)

c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{66}
1.6 ₉	0.39 ₄	0.54 ₉	0.68 ₂	0.42 ₉	0.64 ₈

作为逐步逼近法修正热漫散衍射实验强度值的发散效应的一个例子, 表 4 列出了修正 ϕ 发散过程中各级近似的 x_{ij} 值. 由表 4 看出三个基本事实: 1) 所有的 x_{ij} 值朝着单一方向变化, 最后向由 Alers 等的超声弹性系数算出的 x_{ij} 值趋近, 这一事实表明我们的实验结果与 Alers 等的结果符合较好; 2) 发散修正对最后得到的弹性系数值的正确度具有十分重要的意义, 不加修正情况下(零级近似)将得到完全错误的结果; 3) 只对实验强度经过 ϕ 发散修正, 弹性系数就接近于真正值, 足见 i 及 ϕ 发散修正甚小. 在我们的情况下, i 和 ϕ 发散角分别为 $40'$ 及 $45'$, 修正量为 $1-2\%$; 而 ϕ 发散角约 4° , 修正量则为 $5-20\%$. 需要指出, 由于发散修正量 $d\phi$ 与 $K(f)_g$ 有关, $K(f)_g$ 又与 c_{ij} (即 x_{ij}) 有关[见(4), (5)式], 换句话说, 对于某一特定倒易线, 各被测倒易点的发散修正因子 $d\phi$ 的数值是通过 c_{ij} 而和其他倒易线上的那些 $d\phi$ 相联系, 因而可以想见, 各级近似的 x_{ij} 的数值偏离于真值的程度并不能简单地由发散修正量推出.

表 4 逐步逼近法修正 ϕ 发散过程中各级近似的 x_{ij} 值和超声 x_{ij} 值

近似级别 x_{ij}	0 级	1 级	2 级	3 级	超 声 值 (Alers 等) ^[4]
x_{12}	-0.05 ₅	0.02 ₉	0.15 ₀	0.20 ₉	0.222
x_{13}	0.12 ₁	0.22 ₄	0.28 ₇	0.31 ₈	0.32 ₄
x_{33}	0.32 ₆	0.35 ₀	0.37 ₆	0.39 ₅	0.38 ₇
x_{44}	0.33 ₄	0.28 ₄	0.26 ₅	0.25 ₀	0.23 ₇

Annaka^[5] 也曾提出过一种修正实验值的发散效应的方法. 我们觉得, 用逐步逼近法要比 Wooster^[1,2] 及 Annaka 的方法简便, 节省工作量而且更为准确更为合理.

在我们的实验中, 估计实验的 $K(f)_g$ 比, 误差约 8% (这是在此类实验中的正常的误差范围), 其中较大的误差是来源于白光修正的不确定性. 此外, 绝对的弹性系数的准确度尚受到绝对化媒介的准确度的限制. 可以认为, 倘若能用超声方法测量的样品, 就以不使用 X 射线漫散衍射方法为佳. 当然, 在某些特殊情况下, 例如测量质地柔软的材料或只能获得尺寸甚小的试样的弹性系数时, X 射线漫散衍射的方法仍然有用. 在这种情况下, 就必须以测量入射线强度 I_0 或测量非晶态物质的高角度散射强度, 作为转换媒介的办法进行热漫散衍射强度的绝对化^[1], 从而获得绝对的弹性系数.

由图 4(c) 看到, (OYZ) 倒易平面的各倒易线上的漫散衍射强度直线不交于一点(其他倒易面也有不同程度的类似情况), 并且 010 线的背景特别高, 这些事实表明有某种非弹性因素引起的漫散衍射较强, 这点有待于进一步研究.

本工作是在郭可信先生的关怀和指导下完成的; 在制备试样时, 刘盛炎等同志曾热情

地支援我们以区域提纯生长的锌单晶棒；在X射线测量中，李静环同志也参加了部分工作，这里一并致谢。

参 考 文 献

- [1] Wooster, W. A., *Diffuse Scattering of X-Ray from Crystals* (1962).
- [2] Ramachandern, G. N. & Wooster, W. A., *Acta Cryst.*, **4** (1951), 335; *ibid.*, **4** (1951), 431.
- [3] Grüneison, E. & Goens, E., *Z. Physik*, **25—26** (1924), 235; Bridgman, P. W., *Proc. Amer. Acad. Arts and Sci.*, **60** (1925), 305; Goens, E., *Ann. Physik*, **16** (1933), 793; Hanson, A. W., *Phys. Rev.*, **45** (1934), 324; Wert, C. A. & Tyndall, E. P. T., *J. Appl. Phys.*, **20** (1949), 587.
- [4] Alers, G. A. & Neighbours, J. R., *J. Phys. Chem. Solids*, **7** (1958), 62.
- [5] Annaka, S., *J. Phys. Soc. Japan*, **11** (1956), 937.
- [6] Joynson, R. E., *Phys. Rev.*, **94** (1954), 851.
- [7] Bridgman, P. W., *Phys. Rev.*, **47** (1935), 392.
- [8] Hearmon, R. F. S., *Rev. Mod. Phys.*, **18** (1946), 413.

THE THERMAL DIFFUSE X-RAY SCATTERING AND ELASTIC CONSTANTS OF ZINC

WU TE-CHAN WANG JEN-HUI

(*Academia Sinica*)

ABSTRACT

A method of successive approximation to correct the horizontal and vertical divergences of the diffuse X-ray scattering was developed. The elastic constants of zinc calculated from the corrected thermal diffuse scattering intensity are (in dyne/cm²):

$$c_{11} = 1.6_9, \quad c_{12} = 0.39_4, \quad c_{33} = 0.68_2,$$

$$c_{44} = 0.42_9, \quad c_{66} = \left(\frac{1}{2} c_{11} - \frac{1}{2} c_{12} \right) = 0.64_8.$$

They are found to be in good agreement with those obtained from supersonic measurements.