第30卷 第11期 物理学报 Vol. 30, No. 11
1981年11月 ACTA PHYSICA SINICA Nov., 1981

轻微形变晶体X射线衍射动力学方程的微扰解

林炳昌
(鞍山钢铁学院)

1980年12月29日收到

提 要

用微扰方法讨论了高木 (S. Takagi) 方程,得到了球面入射波情况下轻微形变晶体衍射振幅的微扰解.

一、引 言

X射线衍射动力学对于形变晶体的讨论一般采用高木方程[1]. 它是一个关于振幅傅里叶分量的偏微分方程. 这种类型方程可以用黎曼函数方法求解,但目前能求出解析解的只限于少数简单的情形,主要是 $(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})=Bs_0s_h$ 这种梯度均匀的形变[2—4]. 这里 $\boldsymbol{h}$ 是倒易格矢,$\boldsymbol{u}$ 是位移场(形变场),s_0, s_h 分别为透射与衍射方向的斜坐标,B 为常数. 对于球面入射波情况,得到的结果为一合流超几何函数.

为了对任意形式的形变晶体求解,我们讨论了轻微形变的情形,这时形变可以看作微扰,再配合黎曼函数方法,得到了衍射振幅的积分表达式.

二、高木方程的微扰解

1. 高木方程[1]

$$\frac{\partial\phi_0}{\partial s_0}=-i\pi kc\chi'_{-h}\phi_h. \tag{1}$$

$$\frac{\partial\phi_h}{\partial s_h}=-i\pi kc\chi'_h\phi_0+i2\pi k\beta_h\phi_h. \tag{2}$$

边界条件

$$\phi_0(\boldsymbol{r}_e)=\phi_0(\boldsymbol{r}_e), \tag{3}$$

$$\phi_h(\boldsymbol{r}_e)=0. \tag{4}$$

$$\frac{\partial\phi_0}{\partial s_0}(\boldsymbol{r}_e)=0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial\phi_h}{\partial s_h}(\boldsymbol{r}_e)=-i\pi kc\chi'_h\phi_0(\boldsymbol{r}_e), \tag{6}$$

$$\frac{\partial \phi_h}{\partial s_0}(\boldsymbol{r}_e) = -i\pi k c \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \chi'_h \phi_0(\boldsymbol{r}_e). \tag{7}$$

这里

$$\chi'_h = \chi_h \exp(2\pi i \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{u}), \tag{8}$$

$$\chi'_{-h} = \chi_{-h} \exp(-2\pi i \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{u}). \tag{9}$$

2. ϕ_h 的方程

对(2)式求偏导 $\frac{\partial}{\partial s_0}$，结合(8),(9)及(1)式得

$$\frac{\partial^2 \phi_h}{\partial s_h \partial s_0} - i2\pi\beta_h k \frac{\partial \phi_h}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 c^2 \chi_h \chi_{-h} \phi_h - 2\pi i \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0} \frac{\partial \phi_h}{\partial s_h} - 4\pi^2 k \beta_h \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0} \phi_h = 0. \tag{10}$$

命

$$L \equiv \frac{\partial^2}{\partial s_0 \partial s_h} - i2\pi k \beta_h \frac{\partial}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 c^2 \chi_h \chi_{-h} - 2\pi i \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0} \frac{\partial}{\partial s_h} - 4\pi^2 k \beta_h \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0} \tag{11}$$

则(10)式可简化为

$$L[\phi_h] = 0. \tag{12}$$

3. 微扰处理

把 $(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})$ 看作微扰．命 $L = L_0 + \lambda L_1$，其中

$$L_0 = \frac{\partial^2}{\partial s_h \partial s_0} - i2\pi k \beta_h \frac{\partial}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 c^2 \chi_h \chi_{-h}, \tag{13}$$

$$L_1 = -2\pi i \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0} \frac{\partial}{\partial s_h} - 4\pi^2 k \beta_h \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial s_0}, \tag{14}$$

λ 表示小量，则相应的解 ϕ_h 可表示为

$$\phi_h = \phi_h^{(0)} + \lambda \phi_h^{(1)} + \lambda^2 \phi_h^{(2)} + \cdots, \tag{15}$$

其中 $\phi_h^{(0)}$ 满足

$$L_0[\phi_h^{(0)}] = 0. \tag{16}$$

将 $L = L_0 + \lambda L_1$ 及(15)式代入(12)式，可得

$$L[\phi_h] \equiv L_0[\phi_h^{(0)}] + \lambda L_0[\phi_h^{(1)}] + \lambda L_1[\phi_h^{(0)}] + \lambda^2 L_1[\phi_h^{(1)}] + \cdots = 0. \tag{17}$$

对于 λ 的一次项有

$$L_0[\phi_h^{(1)}] = -L_1[\phi_h^{(0)}]. \tag{18}$$

这就是一级微扰项 $\phi_h^{(1)}$ 所满足的方程．我们取 $\phi_h^{(0)}$ 为入射球面波时理想晶体的解．$\phi_h^{(0)} = AJ_0(\sqrt{4H(x-x_0)(y-y_0)})$，$A$ 为系数，见文献[5]．同样可以讨论高级微扰．

由(14),(4)及(6)式，$\phi_h^{(1)}$ 的边界条件为

$$\phi_h^{(1)}(\boldsymbol{r}_e) = 0, \tag{19}$$

$$\frac{\partial}{\partial s_h}\phi_h^{(1)}(\boldsymbol{r}_e)=(\chi_h'-\chi_h)(-i\pi)kc\phi_0(\boldsymbol{r}_e), \tag{20}$$

$$\frac{\partial}{\partial s_0}\phi_h^{(1)}(\boldsymbol{r}_e)=-i\pi kc(\chi_h'-\chi_h)\frac{\gamma_0}{\gamma_h}(\boldsymbol{r}_e)\phi_0(\boldsymbol{r}_e). \tag{21}$$

4. 微扰方程的黎曼函数

方程(18)的解可用黎曼方法[6],相应的黎曼函数 R 满足方程

$$M[R]=0, \tag{22}$$

其中

$$M=\frac{\partial^2}{\partial s_h\partial s_0}+i2\pi\beta_h k\frac{\partial}{\partial s_0}+\pi^2k^2c^2\chi_h\chi_{-h} \tag{23}$$

边界条件为

$$R=1 \quad 当\ s_0=s_{0p}, \tag{24}$$

$$\frac{\partial R}{\partial s_h}=-i2\pi\beta_h kR \quad 当\ s_h=s_{hp}. \tag{25}$$

作变换,命

$$R=v\exp(-i2\pi k\beta_h s_h), \tag{26}$$

则

$$\frac{\partial^2}{\partial s_0\partial s_h}v+\pi^2k^2c^2\chi_h\chi_{-h}v=0. \tag{27}$$

为简单起见,下面命 $s_0=x$, $s_{0p}=x_0$, $s_h=y$, $s_{hp}=y_0$ 及 $\pi^2k^2c^2\chi_h\chi_{-h}=H$. 则上式为

$$\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}v+Hv=0, \tag{28}$$

边界条件为

$$v=1 \quad 当\ x=x_0, \tag{29}$$

$$\frac{\partial v}{\partial y}=0 \quad 当\ y=y_0. \tag{30}$$

(28)式是著名的电极方程[6]的黎曼函数方程,其解为

$$v=J_0(\sqrt{4H(x-x_0)(y-y_0)}), \tag{31}$$

$$R=J_0(\sqrt{4H(x-x_0)(y-y_0)})\exp(-i2\pi k\beta_h y). \tag{32}$$

5. 结果表示

衍射振幅的结果 $\phi_h=\phi_h^{(0)}+\phi_h^{(1)}$,

$$\begin{aligned}\phi_h^{(1)}=&\iint_G fR\,dxdy+\frac{1}{2}\int_{AB}\left(\frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial x}R-\phi_h^{(1)}\frac{\partial R}{\partial x}\right)dx\\&-\frac{1}{2}\int_{AB}\left(\frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial y}R-\phi_h^{(1)}\frac{\partial R}{\partial y}+i4\pi k\beta_h\phi_h^{(1)}R\right)dy.\end{aligned} \tag{33}$$

这里 $f=-L_1[\phi_h^{(0)}]$, 并注意(19),(20),(21)式等边界条件,有

$$\phi_h^{(1)} = \iint_G - L_1[\phi_h^{(0)}]Rdxdy + \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial x}(\boldsymbol{r}_e)Rdx - \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial y}(\boldsymbol{r}_e)Rdy,$$

其中 G 为三角形 ABP，AB 为晶体表面边界.

$$\phi_h^{(0)} = AJ_0(\sqrt{4H(x-x_0)(y-y_0)})^{[5]},$$

其中 A 为常数. 与(31)式只差一系数 A.

代入得

$$\phi_h = AJ_0(\zeta) - 2\pi iA\iint_G \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial x} J_0(\zeta)\left(\frac{\partial}{\partial y} - 2\pi ik\beta_h J_0\right)(\zeta)dxdy$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial x}(r_e)J_0(\zeta)dx - \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial y}(\boldsymbol{r}_e)J_0(\zeta)dy. \tag{34}$$

这里 $\zeta = \sqrt{4H(x-x_0)(y-y_0)}$. 又因 $J_0'(\zeta) = -J_1(\zeta)$,
故

$$\phi_h = AJ_0(\zeta) - 2\pi iA\iint_G \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial x}\left[\frac{\partial\zeta}{\partial y}J_0(\zeta)J_1(\zeta) - 2\pi ik\beta_h J_0^2(\zeta)\right]dxdy$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial x}J_0(\zeta)dx - \frac{1}{2}\int_{AB} \frac{\partial\phi_h^{(1)}}{\partial y}J_0(\zeta)dy. \tag{35}$$

三、讨　　论

1. 若形变由内部缺陷产生，则可认为表面的位移为零，即 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}_e) = 0$ 这时 (35) 式简化为

$$\phi_h = AJ_0(\zeta) - 2\pi iA\iint \frac{\partial(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})}{\partial x}\left[J_0(\zeta)J_1(\zeta)\frac{\partial\zeta}{\partial y} - 2\pi i\beta_h J_0^2(\zeta)\right]dxdy.$$

2. 实际晶体都带有一定程度的形变，用单晶制成的器件(包括各种 p-n 结)，通过各种工序将进一步产生形变，当这种形变是轻微的，其 $(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u})$ 的形式又不是简单的，这时，利用微扰方法来讨论形变对衍射条纹的影响是有实际意义的.

3. 由于微扰要求 $\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{u}$ 很小，因此对于例如位错等缺陷造成的形变，这里的结果只适用于远离位错心的区域.

由于高木方程的解析解较难得到，这里所做的，主要是想提出一个补充的方法.

感谢北京大学物理系梁静国老师的指导与孙常德同志的讨论.

参　考　文　献

[1] S. Takagi, *J. Phys. Soc. Japan*, **26**(1969), 1239.
[2] O. Litzman, Z. Janacek, *Phys. Stat. Sol.* (a) **25**(1974).
[3] F. N. Chukhovskii, V. P. Petrasen, *Acta. Cryst. A*, 33(1977), 311.
[4] T. Katagawa, N. Kato, *Acta. Cryst. A*, **30**(1974), 830.
[5] N. Kato, *Acta Cryst. A*, **32**(1976), 456.
[6] R. Courant and D. Hilbert, 数学物理方法 II, 科学出版社，第一版(1977).

PERTURBATIVE SOLUTION OF TAKAGI EQUATION IN X-RAY DIFFRACTION DYNAMIC IN SLIGHTLY DEFORMATION CRYSTAL

LING BING-CHANG

(The Anshan Iron and Steel Engineering Institute)

ABSTRACT

This paper discusses Takagi equation by means of perturbation methods. A perturbative solution of diffraction amplitude in slightly deformation crystal is obtained for the spherical incident wave.