

关于 X 射线衍射动力学中高木方程 的一个新解法

孙 长 德 梁 静 国

(北京大学物理系)

1979年12月3日收到

提 要

文中用特征线法解 X 射线衍射动力学的高木 (Takagi) 方程, 给出了普遍解和所需要的近似解的表达式。从数学上指明 Borrmann 三角形的含义。其一级近似解表达式简单明确并和已知的一些理论与实验符合。

一、引 言

X 射线衍射动力学的研究很早就已开始, 自从高木 (Takagi) 导出描述有轻微畸变的晶体的衍射方程之后^[1,2]得到了世界上的公认, 称为高木方程。它是从 Maxwell 方程出发, 并且考虑到波场在固体中传播的 Bloch 波的特性, 摆脱了某些唯象的几何描述, 使衍射动力学的物理内容更丰富了^[3]。由于高木是用 Riemann 函数法求解, 其解在一般情况下不能表达为明显的解析形式, 而必须用计算机作近似计算, 并且波场在晶体内部的情况也不清楚^[4]。因此一些作者^[5-7]在用此方程计算弹性形变下或有层错的晶体的波场时, 都得到了复杂的函数形式。还有些人^[8,9]借助射线光学的程函 (Eikonal) 求解, 得到的结果 (包括近似解) 也是十分复杂的。这样, Kato 等^[10]和 Authier^[11]在讨论有层错的晶体中波场的衍射条纹时, 都事先假设波场的球面波函数形式, 而不能直接利用从高木方程求出的解进行讨论。这就限制了用高木方程去研究 X 射线形貌的衬度问题。本文利用的特征线法求解高木方程, 给出的近似解表达式比较简单, 并且能用以解释观察到的一些实验事实。可望用这个解的形式去解决更多 X 射线衍射衬度问题, 并使一些晶体缺陷的 X 射线形貌观察得出相应的数学结果。

二、运 算

高木^[2]在 1969 年把他导出的 X 射线衍射动力学一阶偏微分方程组化成二阶双曲型方程, 用 Riemann 函数法求解。现在我们从他导出的一阶偏微分方程组出发, 用特征线法求解。设在轻微畸变晶体内的波场为

$$D(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} D'_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) \exp(-i2\pi \mathbf{s}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})), \quad (1)$$

其中

$$s_i(\mathbf{r}) = \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}, \quad \mathbf{k}'_i = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}', \quad \mathbf{g}' = \mathbf{g} + \Delta \mathbf{h}, \quad \Delta \mathbf{h} = -\text{grad}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}). \quad (1.2)$$

这里 $D'_i(\mathbf{r})$ 中的“撇”, 表示有形变时的波场振幅; $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_i$ 分别表示在晶体内透射和衍射方向的波矢量; $\mathbf{k}'_i$ 表示有形变时衍射波矢. $\mathbf{g}$ 和 $\mathbf{g}'$ 分别为完整和有形变时晶格的倒易矢量. $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 为晶体的形变位移矢量, $\Delta \mathbf{h}$ 为由于 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 引起的倒易矢量改变量.

高木方程为

$$\frac{\partial D'_0}{\partial s_0} = -i\pi K C \chi_{-h} D'_h, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial D'_h}{\partial s_h} = -i\pi K C \chi_h D'_0 + i2\pi K \beta'_h D'_h, \quad (2.2)$$

$$\beta'_h(\mathbf{r}) = \frac{k_h'^2 - k^2}{2K^2} \simeq |\mathbf{k}'_h| - k/K = \Delta h/K, \quad (2.3)$$

其中 K 为在真空中的波矢; k 在晶体中的平均波矢; C 偏振因子取 1 (σ 偏振态) 或 $\cos 2\theta_B$ (π 偏振态); χ_h, χ_{-h} 为波场在晶体中的极化系数的富氏分量; s_0 和 s_h 分别为在透射和衍射方向的单位变量.

边条件 令在真空中传播的为球面波或其它普遍形式的波

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}) = \mathcal{D}_0(\mathbf{r}) \exp(-i2\pi \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}). \quad (3.1)$$

在晶体表面上有

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_0(\mathbf{r}_l) \exp(-i2\pi \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_l) &= D'_0(\mathbf{r}_l) \exp(-i2\pi \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_l) \\ &+ D'_h(\mathbf{r}_l) \exp(-i2\pi s_g(\mathbf{r}_l)). \end{aligned}$$

经过一些计算后有边条件

$$D'_0(\mathbf{r}_l) = \mathcal{D}_0(\mathbf{r}_l) \exp(-i2\pi(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}_l), \quad (3.2)$$

$$D'_h(\mathbf{r}_l) = 0. \quad (3.3)$$

这个边条件在用 Riemann 法求解时是正确的, 当用特征线法时, 应把边条件设为 δ -函数形式. 这里本文没有给出 $\mathcal{D}_0(\mathbf{r}_l)$ 的具体解析形式. 首先把方程 (2) 中的变量 s_0, s_h 变换为新变量 z, x ; 图 1 画出了这些量之间的关系 (此图的表示法和文献 [2] 相同). 晶体表面入射点为 $\mathbf{r}_l(z_l, x_l)$, 该点的法向方向为 $\mathbf{n}$, 该点表面曲线的斜率为 $f'(z_l)$. 法线与坐标轴 z 交在 z_1 点, 过 z_1 作 $\mathbf{n}$ 的垂线分别交 s_0, s_h 于 M, N 两点.

从解析几何知法线 $\mathbf{n}$ 的方程为

$$x - x_l = \frac{1}{f'(z_l)}(z - z_l), \quad (4.1)$$

可知 $z_1 = x_l f'(z_l) + z_l$, 线段 $lz_1 = \sqrt{(z_1 - z_l)^2 + x_l^2}$. 利用两直角三角形 $\triangle lz_1 z_l$ 与 $\triangle z_1 M z_2$ 相似, 得

$$z_1 z_2 = x_l \lg \theta_0, \quad z_2 M = (z_1 - z_l) \lg \theta_0.$$

故点 $M(z_2, x_2)$ 的坐标为

$$z_2 = z_1 + z_1 z_2 = z_1 + x_l \lg \theta_0, \quad (4.1.1)$$

$$x_2 = z_2 M = (z_1 - z_l) \lg \theta_0. \quad (4.1.2)$$

这样在 s_0 线上已知两点 $l(z_1, x_1)$ 和 $M(z_2, x_2)$ 的坐标就可定出它的直线方程式 (z, x_0 是两变量)

$$\frac{x_0 - x_1}{z - z_1} = \frac{x_2 - x_1}{z_2 - z_1},$$

即

$$x_0 = C_1 z + C_2, \quad (4.2.1)$$

$$C_1 = \frac{f'(z_1) \operatorname{tg} \theta_0 - 1}{f'(z_1) + \operatorname{tg} \theta_0}, \quad (4.2.2)$$

$$C_2 = x_1 - C_1 z_1. \quad (4.2.3)$$

同理, 对 s_h 线由两直角三角形 $\triangle l z_1 z_1$ 与 $\triangle z_1 N z_3$ 相似得点 $N(z_3, x_3)$ 的坐标为

$$z_3 = z_1 + x_1 \operatorname{tg} \theta_h, \quad (4.1.3)$$

$$x_3 = (z_1 - z_1) \operatorname{tg} \theta_h. \quad (4.1.4)$$

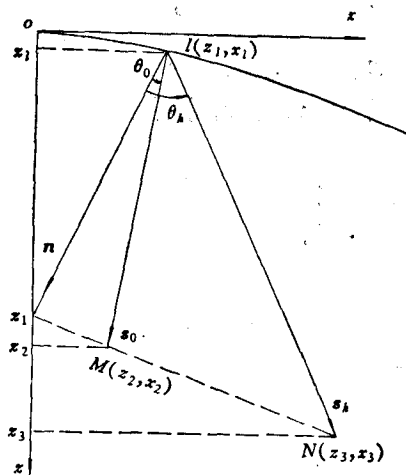


图1 在晶体表面入射点 $l(z_1, x_1)$ 上, s_0, s_h, n 各量之间的关系

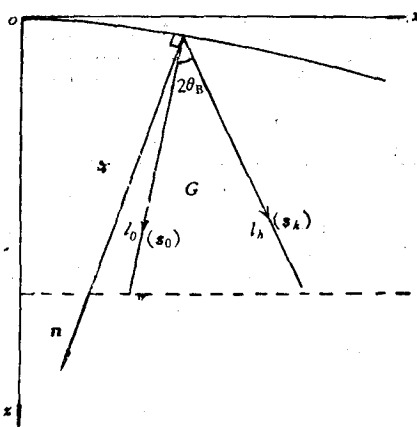


图2 高木方程的特征线 $l_0 l_h$ 围成的三角形

s_h 线的直线方程式 (z, x_h 是两变量)

$$\frac{x_h - x_1}{z - z_1} = \frac{x_3 - x_1}{z_3 - z_1},$$

即

$$x_h = C_3 z + C_4, \quad (4.3.1)$$

$$C_3 = \frac{f'(z_1) \operatorname{tg} \theta_h - 1}{f'(z_1) + \operatorname{tg} \theta_h}, \quad (4.3.2)$$

$$C_4 = x_1 - C_3 z_1. \quad (4.3.3)$$

很明显可视变量 s_0 和 s_h 在坐标平面 zx 内变化, 因而 x_0, x_h 也是整个坐标平面内的变量, 不过有下列关系:

$$s_0^2 = (z - z_1)^2 + (x_1 - x_0)^2, \quad (4.4.1)$$

$$s_h^2 = (z - z_1)^2 + (x_h - x_1)^2. \quad (4.4.2)$$

把函数 D'_0, D'_h 作偏微商

$$\frac{\partial D'_0}{\partial s_0} = \frac{\partial D'_0}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s_0} + \frac{\partial D'_0}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s_0}, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial D'_h}{\partial s_h} = \frac{\partial D'_h}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s_h} + \frac{\partial D'_h}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s_h}. \quad (5.2)$$

先看(5.1)式,根据(4.4.1)式使 x 在 s_0 线上取值,换言之,用 x 代替(4.4.1)式中的 x_0 , 然后在其两端对 s_0 微商有

$$s_0 = (z - z_l) \frac{\partial z}{\partial s_0} - (x_l - x) \frac{\partial x}{\partial s_0}. \quad (5.1.1)$$

由直线方程(4.2.1)把上式中的 $\frac{\partial x}{\partial s_0}$ 化为 $\frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s_0}$, 则有

$$\frac{\partial z}{\partial s_0} = \frac{s_0}{(C_1^2 + 1)(z - z_l)} = \frac{\sqrt{(z - z_l)^2 + (x_l - x)^2}}{(C_1^2 + 1)(z - z_l)}. \quad (5.1.2)$$

把(5.1.2)式代入(5.1.1)式有

$$\frac{\partial x}{\partial s_0} = \frac{C_1^2 s_0}{(C_1^2 + 1)(x - x_l)} = \frac{C_1^2 \sqrt{(z - z_l)^2 + (x_l - x)^2}}{(C_1^2 + 1)(x - x_l)}. \quad (5.1.3)$$

将(5.1.2), (5.1.3)式和方程(2.1)代入(5.1)式得

$$\frac{\partial D'_0}{\partial z} + C_1 \frac{\partial D'_0}{\partial x} = -i\pi K C \chi_{-h} D'_h \sqrt{(C_1^2 + 1)}. \quad (6.1)$$

类似于对 s_0 的考虑和运算,对 s_h 的(5.2)式结合(4.4.2)式及其直线方程(4.3.1)有

$$\frac{\partial z}{\partial s_h} = \frac{s_h}{(C_3^2 + 1)(z - z_l)} = \frac{\sqrt{(z - z_l)^2 + (x - x_l)^2}}{(C_3^2 + 1)(z - z_l)}, \quad (5.2.1)$$

$$\frac{\partial x}{\partial s_h} = \frac{C_3^2 s_h}{(C_3^2 + 1)(x - x_l)} = \frac{C_3^2 \sqrt{(z - z_l)^2 + (x - x_l)^2}}{(C_3^2 + 1)(x - x_l)}. \quad (5.2.2)$$

将(5.2.1), (5.2.2)式及方程(2.2)代入(5.2)式得

$$\frac{\partial D'_h}{\partial z} + C_3 \frac{\partial D'_h}{\partial x} = (-i\pi K C \chi_h D'_0 + i2\pi K \beta'_h D'_h) \sqrt{C_3^2 + 1}. \quad (6.2)$$

这样解高木方程(2.1), (2.2)就变为解方程组(6.1)和(6.2), 根据解一阶线性偏微分方程组的特征理论^[12], 令

$$\frac{dx}{dz} = \lambda_i \quad i \text{ 取 } 0, \text{ 或 } h, \quad (7.1)$$

作函数 D'_0 的微商

$$\frac{dD'_0}{dz} = \frac{\partial D'_0}{\partial z} + \frac{\partial D'_0}{\partial x} \lambda_0 = f_0(z). \quad (7.1.1)$$

将(7.1.1)与(6.1)式联立,并使其 $\frac{\partial D'_0}{\partial z}$, $\frac{\partial D'_0}{\partial x}$ 的系数行列式为 0,

$$\begin{vmatrix} 1 & \lambda_0 \\ 1 & C_1 \end{vmatrix} = 0, \quad (7.1.2)$$

解之得

$$\lambda_0 = C_1. \quad (7.1.3)$$

将其代回(7.1)式,并结合给定的人射点 $l(z_l, x_l)$ 积分,得特征线方程

$$x = C_1 z + C_2. \quad (7.1.4)$$

这里 C_1 取“+”号,如取负号也是可以的. 不难发现这个特征线和 s_0 线的方程一致.

同理,对函数 D'_h 微商

$$\frac{dD'_h}{dz} = \frac{\partial D'_h}{\partial z} + \frac{\partial D'_h}{\partial x} \lambda_h = f_h(z). \quad (7.2.1)$$

将其与(6.2)式联立并类于上步骤解得

$$\lambda_h = C_3, \quad (7.2.2)$$

以及其特征线方程为

$$x = C_3 z + C_4. \quad (7.2.3)$$

这里 C_3 也取“+”号. 这个方程与 s_h 线的方程一致,从图 2 可见,特征线 l_0, l_h 分别与线 s_0, s_h 重合,假如在特征线的前端作一平行于 x 轴的直线,则与 l_0, l_h 所围成的三角形即 Borrmann 三角形.

三、结 果

方程组 (6.1), (6.2) 的普遍解析解可表为^[12]

$$D'_i(z, x) = D'_i(z_l, x_l) + \int_{l_i} \sum_{j=0,h} \alpha_{ij} D'_j dz, \quad (8)$$

i 取 0 或 h , l_i 为特征线, $D'_i(z_l, x_l)$ 为在入射点 $l(z_l, x_l)$ 的初值. 此积分方程组常用逐次逼近法求解,可以证明这是一个收敛的函数序列. 其极限函数就是此方程组存在的唯一的解析解. 在本文粗略考虑的边条件 (3.2), (3.3) 式下,

$$\begin{aligned} D_0^{(1)} &= D'_0(z_l, x_l) + \int_{l_0} -i\pi K C \chi_{-h} D_h^{(0)} \sqrt{C_1^2 + 1} dz \\ &= D'_0(z_l, x_l) \\ &= \mathcal{D}_0(z_l, x_l) \exp(-i2\pi(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}_l), \end{aligned} \quad (8.1.1)$$

$$\begin{aligned} D_0^{(2)} &= D'_0(z_l, x_l) + \int_{l_0} -i\pi K C \chi_{-h} D_h^{(1)} \sqrt{C_1^2 + 1} dz \\ &= D'_0(z_l, x_l) - D'_0(z_l, x_l) \frac{\pi^2}{2} K^2 C^2 \chi_h \chi_{-h} [(z - z_l)^2 + (x - x_l)^2], \end{aligned} \quad (8.1.2)$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$D_0^{(n+1)} = D'_0(z_l, x_l) + \int_{l_0} -i\pi K C \chi_{-h} D_h^{(n)} \sqrt{C_1^2 + 1} dz. \quad (8.1.3)$$

同理对 D'_h 也有

$$\begin{aligned} D_h^{(1)} &= D'_h(z_l, x_l) + \int_{l_h} (-i\pi K C \chi_h D_0^{(0)} + i2\pi K \beta'_h D_h^{(0)}) \sqrt{C_3^2 + 1} dz \\ &= -i\pi K C \chi_h D'_0(z_l, x_l) \sqrt{(z - z_l)^2 + (x - x_l)^2}, \end{aligned} \quad (8.2.1)$$

$$\begin{aligned} D_h'^{(2)} &= D_h'(z_l, x_l) + \int_{l_h} (-i\pi K C \chi_h D_0'^{(1)} + i2\pi K \beta_h' D_h'^{(1)}) \sqrt{C_3^2 + 1} dz \\ &= -i\pi K C \chi_h D_0'(z_l, x_l) \sqrt{(z - z_l)^2 + (x - x_l)^2} + 2\pi^2 K^2 C \chi_h D_0'(z_l, x_l) \\ &\quad \cdot (C_3^2 + 1) \int_{l_h} \beta_h' \cdot (z - z_l) dz, \end{aligned} \quad (8.2.2)$$

参 考 文 献

- [1] S. Takagi, *Acta Cryst.*, **15**(1962), 1311.
- [2] S. Takagi, *J. Phys. Soc. Japan.*, **26**(1969), 1239.
- [3] N. Kato, *Z. Naturforsch.*, **28A**(1973), 604.
- [4] B. K. Tanner, *X-Ray Diffraction Topography*, (1976), p. 20.
- [5] T. Katagawa, N. Kato, *Acta Cryst.*, **A30**(1974), 830.
- [6] O. Litzman, Z. Janacek, *Phys. Stat. Sol. (A)*, **25**(1974), 663.
- [7] A. Authiez, D. Simon, *Acta Cryst.*, **A24**(1968), 517.
- [8] N. Chukhovskii, P. V. Petrashen, *Acta Cryst.*, **A33**(1977), 311.
- [9] Z. G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals*, (1978), p. 371.
- [10] N. Kato *et al.*, *Advances in X-Ray Analysis*, **10**(1967), 46.
- [11] A. Authier, *Phys. State Sol.*, **27**(1968), 77.
- [12] 复旦大学数学系主编, 数学物理方程(第二版), (1961), 355; R. 柯朗, D. 希尔伯特著, 数学物理方法 II, (1977), 49.
- [13] A. Authier, *Modern Diffraction and Imaging Techniques in Material Science*, (1970), p. 492.

A NEW METHOD OF SOLVING THE TAKAGI EQUATION OF THE DYNAMICAL THEORY OF X-RAY DIFFRACTION

SUN ZHANG-DE LIANG JING-GUO
(Physics Department, Peking University)

ABSTRACT

The Takagi equation of the dynamical theory of X-ray diffraction is solved by the method of characteristic curve. The expressions of the strict and approximate solution have been derived. The meaning of Borrmann triangle is explained by the solution. To the first order, this expression of approximate solution is simple and explicit and coincides with known theory and basic experiments.