

# Darwin 方程在劳厄情况的二维解析解

周云松 杨 桢 胡华琛

(中国原子能科学研究院, 北京 102413)

(1994年5月9日收到)

用求极限的方法获得了 $\delta$ 束在劳厄情况下入射平行平板晶体的边界条件,从而求得了 Darwin 方程的二维解析解,并指出这个解不仅限于平板晶体而是在一个更宽松的条件下成立。对 Werner 于1965年得出的关于这个问题的结果提出不同看法。

PACC: 6110D; 7870B

## 1 引 言

在晶体衍射动力学理论的几种表述形式中, Darwin 方程<sup>[1]</sup>是最具有直观性、实用性和普遍性的(能将X射线、电子和中子的衍射性质统一描述)。它直接描述束流强度的变化,使得许多问题的研究最终归结为求解 Darwin 方程。由于无限及有限宽均匀入射束具有较高的对称性,使问题得以简化,其在不同情况下入射到平行平板晶体中的行为基本上都已解决。当入射强度非均匀分布时,求解 Darwin 方程是困难的。但如果获得了 $\delta$ 束入射的解析解,以其作为 Green 函数,通过积分就可得知任意强度分布的入射束在晶体中的行为。 $\delta$ 束指单位时间内入射到晶体中的粒子数为定值(不为零)的无限细束。目前已解出。 $\delta$ 束的二维解有如下几种: 半无限厚平面晶体布喇格情况<sup>[2]</sup>; 有限厚平板晶体布喇格情况(能包含半无限厚平晶)<sup>[3]</sup>; 有限厚平板晶体劳厄情况<sup>[4]</sup>。但是最后这种情况的解是错误的。原因是边界条件用错了。我们曾提出一个求极限的方法处理 $\delta$ 束边界条件,并用它成功地求解了平板晶体布喇格情况的解<sup>[5]</sup>。本文将再次使用这种方法处理平板晶体劳厄情况。

## 2 解 析 解

Darwin 方程<sup>[1,5]</sup>

$$\frac{\partial I_0}{\partial x} = -\Sigma_t I_0 + \Sigma_s I_H, \quad \frac{\partial I_H}{\partial y} = -\Sigma_t I_H + \Sigma_s I_0, \quad (1)$$

$I_0, I_H$  分别为透射和反射束流强度,  $\Sigma_t$  是单位体积的晶体的散射截面,  $\Sigma_t = \Sigma_s + \mu$ ,  $\mu$  是线吸收系数。 $x$  轴和  $y$  轴分别沿透射和反射方向。(1)式通解为

$$I_0(x, y) = e^{-\Sigma_t(x+y)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_{n-1}(x/y)^{n/2} \tilde{I}_n[2\Sigma_t(xy)^{1/2}], \quad (2)$$

$$I_H(x, y) = e^{-\Sigma_t(x+y)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n(x/y)^{n/2} \tilde{I}_n[2\Sigma_t(xy)^{1/2}].$$

$\tilde{I}_n$  是  $n$  阶修正贝塞耳函数,  $a_n$  是待定系数.

劳厄几何如图 1 所示. 求解区为  $x$  轴与  $y$  轴及晶体背面所围成的三角形. 可选  $x$  轴与  $y$  轴上的反射强度做为边界条件, 分别记为  $\delta I_H(x, 0)$  及  $\delta I_H(0, y)$ . 由于  $\delta$  束沿  $x$  轴的束流强度无穷大, 所以应当考虑无限接近  $x$  轴但并不在  $x$  轴上的值. 图 2 所示为一个宽为  $l$ , 单位时间内入射粒子数为  $N$  的匀强入射束,  $BC$  线上的值在  $l \rightarrow 0$  时便是  $\delta$  束的边界条件. 已知半无限宽入射束(以图 2 中 0 点为起点向下无限扩展)的解  $I_H^w(x, y)$  具有 (2) 式的形式, 系数为<sup>[4]</sup>:

$$a_{-1} = i, \quad (3)$$

$i$  是入射束强度. 其它系数不必在此写出.  $A$  点坐标为  $(-x_0 l, y_0 l)$ , 其中

$$x_0 = \cot \alpha_1 + \cot 2\theta_B, \quad y_0 = 1 / \sin 2\theta_B, \quad (4)$$

$\theta_B$  是布喇格角. 所以宽为  $l$  的入射束的解可表示为

$$I_H(x, y) = I_H^w(x, y) - I_H^w(x + x_0 l, y - y_0 l).$$

将  $BC$  线的方程  $y = y_0 l$  代入上式得到  $BC$  线上反射强度为

$$I_H^{BC} = I_H^w(x, y_0 l).$$

注意到入射强度  $i = N/l$ ,  $N$  是单位时间内入射的粒子数, 当  $l \rightarrow 0$  时,  $i \rightarrow \infty$ , 表示从有限宽束变成了  $\delta$  束,  $I_H^{BC}$  也就变成了  $\delta$  束的边界条件. 利用 (2) — (4) 式得到

$$\delta I_H(x, 0) \equiv \lim_{l \rightarrow 0} I_H^{BC} = N \Sigma_t y_0 e^{-\Sigma_t x}, \quad (5)$$

由 (1) 式得知图 1 中  $y$  轴上反射强度为

$$\delta I_H(0, y) = \delta I_H(0, 0) e^{-\Sigma_t y},$$

利用 (5) 式定出上式的  $\delta I_H(0, 0)$ , 得到

$$\delta I_H(0, y) = N \Sigma_t y_0 e^{-\Sigma_t y}. \quad (6)$$

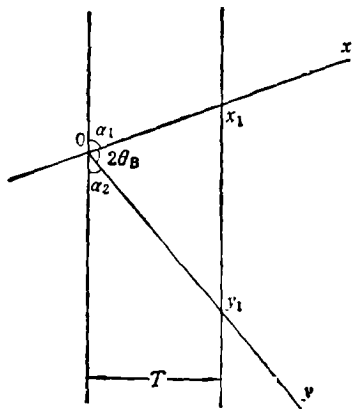


图 1  $\theta_B$  是布喇格角  $\alpha_1, \alpha_2$  分别是晶体表面与  $x$  轴和  $y$  轴夹角

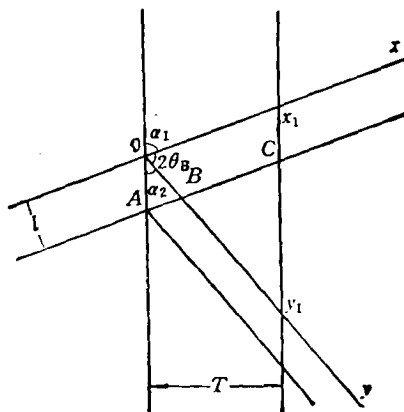


图 2 宽为  $l$  的匀强束入射平板晶体

由(2),(5),(6)式得  $\delta$  束解析解为

$$\begin{aligned} I_H(x, y) &= \Sigma_s y_0 N e^{-\Sigma_t(x+y)} \bar{I}_0 [2 \Sigma_s (xy)^{1/2}], \\ I_0(x, y) &= \Sigma_s y_0 N e^{-\Sigma_t(x+y)} (x/y)^{1/2} \bar{I}_1 [2 \Sigma_s (xy)^{1/2}] + N y_0 e^{-\Sigma_t x} \delta(y). \end{aligned} \quad (7)$$

在  $I_0(x, y)$  中多加了一项((7)式第二式等号右端第二项), 是指在  $x$  轴上将发散, 而第一项的定义域以  $x$  轴为开区间边界。

### 3 讨 论

将图 1 中晶体背面方程  $y = -\frac{y_1}{x_1} x + y_1$  代入(7)式再积分可得反射率

$$R_H = \frac{1}{N} \int_0^{x_1} I_H(x, y(x)) \sin 2\theta_0 dx,$$

其中  $x_1 = T / \sin \alpha_1$ ,  $y_1 = T / \sin \alpha_2$ ,  $T$  是晶体厚度。上式可变形为

$$R_H = A_k \int_0^1 e^{-\gamma_c A_k [(1-b)\eta + b]} \bar{I}_0 [2 A_k \eta^{1/2} (1-\eta)^{1/2} b^{1/2}] d\eta,$$

其中  $\eta = x/x_1$ ,  $b = y_1/x_1$ ,  $A_k = \Sigma_s x_1$  (折合厚度),  $\gamma_c = \Sigma_t / \Sigma_s$ 。

图 3 表示无吸收时的反射率, 不同的  $b$  值反映不同的切割角(反射面与晶体表面的夹角)。图 3 中有两种曲线, 分别由圆圈和实线构成。前者利用(7)式计算得出, 后者所依据的公式可直接由一维 Darwin 方程<sup>[6]</sup>导出。虽然推导时假设入射束无限宽, 但在平板晶体中反射率是与束形无关的, 对于  $\delta$  束也适用。考虑计算误差因素, 可以认为两种曲线完全重合。这验证了(7)式的正确性。如果将(2)式代入(1)式, 可将  $e^{-\Sigma_t(x+y)}$  消去, 说明待定系数  $a_s$  与吸收系数  $\mu$  无关。所以(7)式只要在没有吸收情况下正确, 就可以肯定有吸收时也是正确的。

求透射率应当在晶体背面对所有透射束积分。但更感兴趣的是至少经过两次散射的透射束, 或说不包括直接沿  $x$  轴穿过晶体的透射束。因此定义透射率为

$$R_0 = \frac{1}{N} \int_0^{x_1} I_0[x, y(x)] \frac{y_1}{x_1} \sin 2\theta_0 dx,$$

积分上限  $x_1$  表示积分区间为  $[0, x_1)$ 。  $R_0$  随  $A_k$  变化如图 4 所示。图 4 的纵轴  $R$  表示  $R_H$ ,  $R_0$  及  $R_H + R_0 \equiv P$  的数值。图 4 反映了这样的物理图象, 当晶体较薄时,  $P < 1$ , 由于无吸收时粒子数守恒,  $P$  中所缺少的部分是没有经过散射直接从  $x$  轴穿过的那部分。这时可将  $x$  轴看成一条线形“光”源, 不断沿  $y$  轴方向向晶体中发“光”, 并随着穿透深度的增加而衰减。当  $A_k = 5-6$  时, 它已经非常微弱, 在这样的厚度上几乎所有的粒子都要遭到散射, 所以  $P=1$ 。

无吸收反射强度分布如图 5 所示。  $b=1$  的曲线是对称劳厄情况, 其它两条是非对称的。  $b=0.5$  的曲线在  $x$  较小的地方值较大, 在  $x$  大的地方值较小。这是由于  $b=0.5$  对应着晶体背面在  $y$  轴的截距比在  $x$  轴的截距短, 靠近  $y$  轴出射的粒子, 由  $x$  轴这个线形“光”源发出后, 在晶体中走过的路程比  $b=1$  的情况要短。所以散射成  $I_0$  的部分就少, 出射时较强。  $x$  较大时情况正好相反。  $b=2$  的曲线也是这个原因, 只是情况相反。图

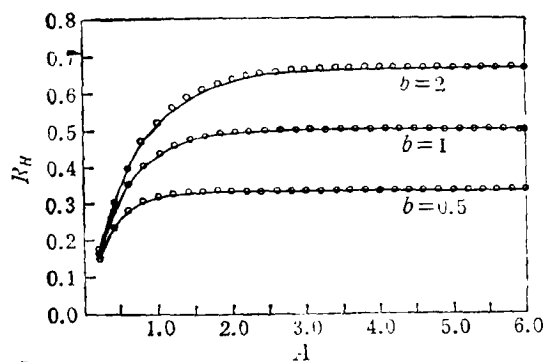
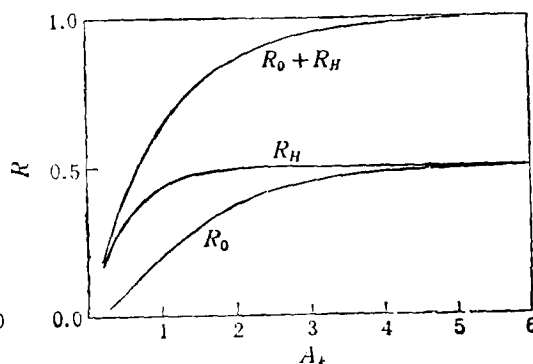
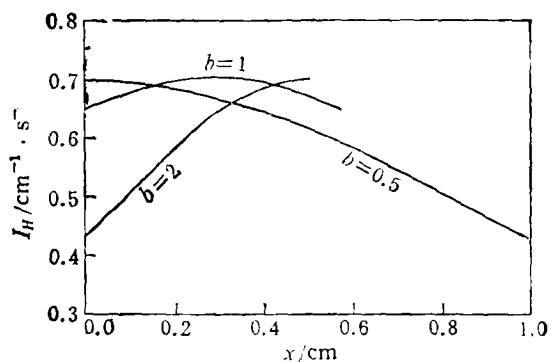
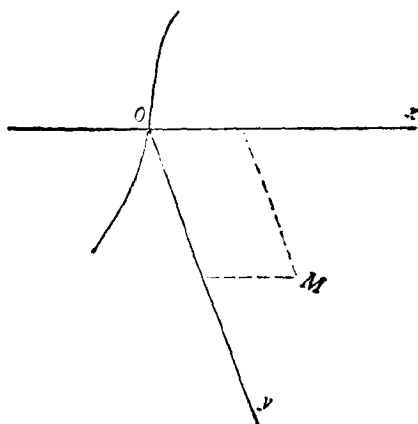
图3 实线为层模型结果;“○”为本文结果 $\mu = 0$ 图4  $\mu = 0$ 图5 晶体厚度  $T = 0.5\text{cm}$ ,  $\Sigma_i = 1\text{cm}^{-1}$ ,  $\mu = 0$ ,  $\theta_B = 30^\circ$ ,  $N = 1\text{s}^{-1}$ 

图6 曲线是晶体表面

3 中不同的反射率也是很好理解的,  $b = 0.5$  相当于线形“光”源与晶体背面贴得很近,  $I_H$  粒子很容易穿过。  $b = 2$  则相反,  $I_H$  粒子要穿过一块较厚的晶体。

从(5)和(7)式中除去  $y_0$  因子后, 就分别成为文献[4]中所用的边界条件和所得结果。其两处都没有  $y_0$  看来并非笔误, 而是边界条件处理不当。但其边界条件的获得并没有论述, 无法分析, 只能指出其错误所在: 第一不能使图3中两种曲线完全重合; 第二当无吸收时,  $A_k$  的增加不能使  $P$  趋近于 1 而是趋近于  $\sin 2\theta_B$ , 这与粒子数守恒相矛盾。

最后指出, 虽然利用平行平板晶体求得(7)式, 但其中并没有任何关于晶体形状的信息, 这就大大扩展了它的适用范围。只要晶体表面光滑, 由偏微分方程理论可以证明: 对任一点  $M$ , 只要能按图6所示形成一个完全被晶体覆盖的矩形,  $M$  点的解就是(7)式。

## 4 结 论

本文求得了  $\delta$  束入射劳厄情况的解析解, 同时指出了以前关于这个问题的某些错误。通过求极限的方法而获得了  $\delta$  束的边界条件, 由于这种方法在布喇格情况也获得了成功, 说明这种方法是很有效的。

- [1] C. G. Darwin, *Phil. Mag.*, **43** (1922), 800.
- [2] S. A. Werner and A. Arrott, *Phys. Rev.*, **140** (1965), A675.
- [3] 周云松、杨楨、胡华琛, 物理学报 **44**(1995), 726
- [4] S. A. Werner, A. Arrott, J. S. King and H. Kendrick, *J. Appl. Phys.*, **37** (1966), 2343.
- [5] W. C. Hamilton, *Acta Cryst.*, **10** (1957), 629.
- [6] H. C. Hu and Y. H. Fang, *J. Appl. Cryst.*, **26** (1993), 251.

## SOLUTION FOR DARWIN EQUATION IN LAUE CASE

ZHOU YUN-SONG YANG ZHEN HU HUA-CHEN

(Institute of Atomic Energy of China, Beijing 102413)

(Received 9 May 1994)

### ABSTRACT

The boundary condition of  $\delta$ -function incident beam in Laue case can be obtained by employing the method of limit. A new analytical solution for Darwin equation in planeparallel crystal has been obtained with this boundary condition, which is different from Werner's. Our result is also valid in more general case.

PACC: 6110D; 7870B