

一种去除小角散射中狭缝污染的矩阵方法

贺 健 杨同华

(中国原子能科学研究院热中子散射实验室, 北京 102413)

(1995年3月23日收到)

对于采用狭缝准直系统的小角散射谱仪, 由此产生的散射强度曲线畸变污染必须予以扣除. 在分割分布函数法的基础上, 发展了一种去污染矩阵方法; 在特定条件下, 用简单的线性运算取代了常规的求解积分方程方法; 实际使用效果良好. 涉及矩阵运算和小角散射实验测量的特殊之处也进行了详细讨论.

PACC: 6112E; 0760; 0620H

中低通量研究用反应堆上的中子小角散射谱仪, 出于提高束流利用率、改善结果统计性的考虑, 一般以损失谱仪角分辨率为代价, 采用狭缝准直系统. 而严格的小角散射理论建立在理想准直条件, 即针孔光阑准直系统之上的. 对狭缝所造成的、畸变的散射效应曲线, 如何进行修正并使之还原成为理想准直条件下的、无狭缝污染的效应曲线, 一直是个比较复杂又无法回避的问题. 由于我们常常要借理想散射曲线才可能提取出有关样品内部结构的准确信息, 例如样品的分形维数, 相关函数等统计物理量. 所以我们通过对分割分布函数法的使用发展了一种去污染矩阵算法, 取得了很好效果.

1 变换矩阵的引入

分割分布函数法^[1,2]是针对稀疏颗粒体系求取其粒度分布 $P(R)$ 的一种小角散射常规测量方法. 假设体系中参与散射的颗粒之间不存在相互干涉效应, 彼此的单体散射强度可直接加和. 则在采用狭缝准直系统, 入射光束存在畸变污染的情况下, 有

$$I_j = A_{j,i} \times W_i. \quad (1)$$

在理想准直条件下(针孔光阑, 线光路), 无狭缝污染, 则有

$$i_j = a_{j,i} \times W_i, \quad (2)$$

其中 I, i 均为 $j \times 1$ 的列矩阵, 分别代表在 j 个入射波矢转移量 S_j (观测角度) 处记录到的、畸变的和理想的散射强度. W 是一个 $i \times 1$ 的列矩阵, 代表参与散射的颗粒在 i 个递增的粒度分割区间 $[R_0, R_1], [R_1, R_2] \cdots [R_{i-1}, R_i]$ 上, 以体积为权的直方分布. A, a 则是 $j \times i$ 的系数矩阵, 阵元表达式分别为

$$A_{j,i} = T \times \int_0^\infty F(t) dt \int_{R_{i-1}}^{R_i} R^3 \times \Phi^2[\sqrt{(S_j)^2 + (2\pi t/\lambda)^2}, R] dr, \quad (3)$$

$$a_{j,i} = T \times \int_{R_{i-1}}^{R_i} R^3 \times \Phi^2(S_j, R) dt, \quad (4)$$

$F(t)$ 为狭缝准直系统权重函数, 是其宽度权重函数 $G(t)$ 与高度权重函数 $H(t)$ 的卷积运算结果, 即 $F(t) = G(t) * H(t)$. $[R_{i-1}, R_i]$ 为第 i 个粒度分割区间及其下上限; Φ 是特征尺度为 $2R$ 的颗粒在水平观测角度 θ_j 处的散射振幅, 称为颗粒形散函数; $S_j = 2\pi \sin(\theta_j)/\lambda$, 是入射波矢转移量, λ 为入射(中子或 X 光)束的波长; T 是一综合常数. t 为与 θ 等价的, 垂直角度参变量.

$G(t)$, $H(t)$ 既可由狭缝准直系统的几何条件经计算确定^[3,4]; 也能直接从实验测量得出^[5]. 我们采用后者, 实验所用简易中子小角谱仪布局、几何参数和操作可参见图 1. 具体实验条件: 1) 将谱仪的全部工作参数调至最佳状态, 探测器对准入射束方向, $S = 0$. 2) 样品台不放样品. 3) 使样品台位置之后、所有可能对入射束产生影响的狭缝系统部分(即探测器和接收狭缝)一同平移; 同时逐点记录入射束强度 I 随探测器位置 θ 或 t 的变化曲线. 4) 平移一般在垂直于入射束的探测平面内, 分别沿水平(狭缝宽度方向)和垂直(狭缝高度方向)两正交方向进行, 见图 1 中的有关符号. 5) 所测得两条强度摆动曲线即为 $G(t)$ 、 $H(t)$, 两者再经离散卷积得 $F(t)$ ^[4,5], 结果见图 2. 我们所用小角谱仪的平面图和 $F(t)$ 如图 1, 2 所示, 后者等价于入射束半高宽为 1° 的圆孔准直系统; 而理想条件下的针孔准直系统, $F(t) = \delta(t)$. 所以采用狭缝准直系统的直接后果就是在提高了结果统计性的同时, 必然损失角分辨率.

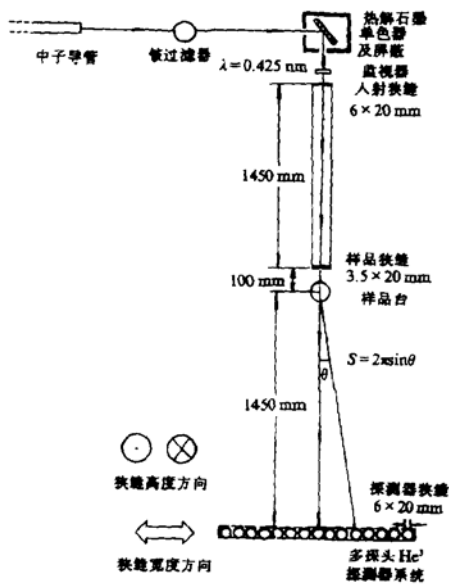


图 1 简易中子小角散射谱仪平面图

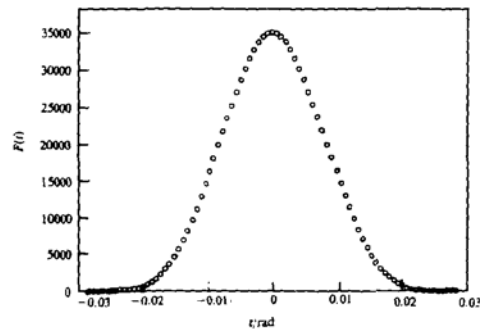


图 2 简易中子小角谱仪的狭缝准直系统权重函数 $F(t)$, 图中强度为相对测量值

在理想准直条件下, $F(t) = \delta(t)$, (3) 式退化为 (4) 式; 同时线性方程组 (1) 也退化为 (2). 求解 W_n 首先要从构造系数矩阵开始, 系数矩阵就是我们为颗粒体系所建立的模型(下同). 它一般包括: ① 颗粒的形散函数 $\Phi(S, R)$, 可由颗粒的形状和内部结构唯一

地确定; ② 粒度分割区间 $[R_{i-1}, R_i]$ 和 ③ 观测角度 S_j 三项内容, 由 (3) 式统一表述. 其中尤以 ① 最为关键.

对同一样品使用两台仅仅准直系统不同的小角散射谱仪, 借助于相同的颗粒体系模型分别测量求解. 一套采用狭缝准直, 对应 (1) 式; 另一套则是理想准直, 对应于 (2) 式. 取

粒度分区数目 i 和测量角度数目 j 为 $i = j = n$ 时,可对线性方程组(1)和(2)分别求解此样品的粒度直方分布 W_n . 如果 W_n 有解,则两方程组所给出的解,在误差允许范围内应相同(或相差一常数因子 G ,不妨假设 $G = 1$). 两者的同解性是由(1)至(4)式,和(17)式的物理含义^[5]决定的,并得到实验结果的支持^[6-8]. (1)式的解可写成

$$W_n = (A_{n,n})^{-1} \times I_n, \quad (5)$$

$(A_{n,n})^{-1}$ 为矩阵 $A_{n,n}$ 的逆矩阵. 将(5)式代入(2)式可得

$$i_n = a_{n,n} \times (A_{n,n})^{-1} \times I_n \quad (6)$$

或

$$I_n = A_{n,n} \times (a_{n,n})^{-1} \times i_n. \quad (7)$$

显然可依据(6)式将污染的散射强度值 I_n 在 n 个角度上变换成对应的无污染强度值 i_n , 从而去除狭缝的污染. 因此我们定义 $C_{n,n}$ 为“去污染变换矩阵”

$$C_{n,n} = a_{n,n} \times (A_{n,n})^{-1}. \quad (8)$$

反之, $(C_{n,n})^{-1} = A_{n,n} \times (a_{n,n})^{-1}$ 则可称为“加污染变换矩阵”. 在理想准直条件下, $F(t) = \delta(t)$, (7)式中 $C_{n,n}$ 退化为单位矩阵 $U_{n,n}$, 此时强度无需修正. 可见狭缝污染的情况不仅直接体现在 $F(t)$ 与 $\delta(t)$ 的偏离程度中,同时也间接地在 $C_{n,n}$ 与 $U_{n,n}$ 的偏差中得到定量反映!

2 不同模型变换矩阵之间的等价性

可以选择不同的颗粒系模型来构造出相应的 $A_{n,n}$ 和 $a_{n,n}$ 代入(1)或(2)式中求解 W_n . 如果 W_n 对某些模型有解,那么这些解显然会随着所选模型的不同而不同. 需要明确的是:一方面,这些解只是等价的“ n 点强度拟合”解,并不一定能给出相互吻合的样品结构信息;但另一方面,由于这 n 点强度值又在一定程度上反映了某些样品结构信息,因而并非任何形式的形散函数 Φ 都能“拟合”成功. 当然,只有 W_n 有解的模型才可以由各自的 $A_{n,n}$ 和 $a_{n,n}$ 依(6)式求得相应的、彼此各异的变换矩阵 $C_{n,n}$. 如无特别说明,以下讨论均在 W_n 有解的条件下进行. 我们假定 $H_{n,n}$ 和 $Y_{n,n}$ 是依据不同类型颗粒系模型所得到的变换矩阵, $H_{n,n} \neq Y_{n,n}$. 当选用某一台谱仪对同一样品,在确定的 n 个角度测量时,因为样品的无污染强度 i_n 及其对应的有污染强度 I_n 仅仅由样品内部结构和谱仪准直系统参数决定,与所选择的诠释模型无关, i_n 和 I_n 都是唯一确定的. 这是任何一种去污染方法都应无条件遵守的“去污染变换的不变性”. 所以恒有

$$i_n = H_{n,n} \times I_n = Y_{n,n} \times I_n \quad (9)$$

成立. 因为 $H_{n,n}$ 和 $Y_{n,n}$ 都是非空矩阵,所以要特别注意:由(9)式依矩阵运算法则不能推出 $H_{n,n} = Y_{n,n}$;而且即便 $H_{n,n} \neq Y_{n,n}$ 也不妨碍(9)式成立. 我们针对球、柱和片状颗粒体系求取了各自的变换矩阵,证实了(9)式的正确性. 存在于 I_n 和 i_n 之间的变换矩阵,不必要也不可能是唯一的;不同的变换矩阵之间的等价性体现在对同一条畸变污染曲线变换结果唯一,这与“去污染变换的不变性”高度一致.

3 变换矩阵的存在性与系数矩阵主元优化

W_n 的存在是变换矩阵 $C_{n,n}$ 存在的前提条件. 只要对某种模型 W_n 有解, 则无论其是否有物理意义(分割分布函数法及模型本身, 在计算中仅仅起“桥梁”的作用, 勿需考虑其对样品的适用性如何); 在给定的观测角度上, 就一定能得到只取决于谱仪准直系统几何参数的变换矩阵. 所以有必要讨论一下非齐次线性方程组(1), (2)中 W_n 的求解问题. 引入矩阵总体优化度 Q 和行优化度 E_j 的概念来刻画矩阵总体的和第 j 行的优化水平:

$$Q = \left\{ \sum_{j=1}^n [a_{j=i} / (a_{j \neq i})_{\max}] \right\} / n, \quad (10)$$

$$E_j = a_{j=i} / (a_{j \neq i})_{\max}, \quad (11)$$

$(a_{j \neq i})_{\max}$ 是第 j 行的、非对角元中的最大元. 以(1)式为例(对(2)式同理), 其有解的充分必要条件是: 系数矩阵 $A_{n,n}$ 与相应增广矩阵 $Z_{n,n+1}$ ($Z_{n,n+1}$ 是在 $A_{n,n}$ 右侧增加一列对应 I_n) 等秩. 而(6)式、(7)式中计算过程的可逆性要求 $A_{n,n}$ 和 $a_{n,n}$ 为可逆矩阵, 即要求它们都是满秩矩阵. 由线性代数中的克莱姆(Cramer)定理可知: 当 $A_{n,n}$ 满秩时, (1)式有且唯一解; 从而变换矩阵 $C_{n,n}$ 存在. 当然, 在 $A_{n,n}$ 与 $Z_{n,n+1}$ 等秩但本身不满秩等情况下, $C_{n,n}$ 也可能存在但既不唯一又不可逆. 所以, 从方法的严谨性和使用方便的角度出发, 不妨每次都预先检验一下所构造的 $A_{n,n}$ 是否满秩. 如满秩, 可依(6)式、(7)式求出 $C_{n,n}$ 和 $(C_{n,n})^{-1}$. 如不满秩, 可重新选择模型参数、构造 $A_{n,n}$ 和 $a_{n,n}$. 但从(9)式可知, 无需专门证明 $C_{n,n}$ 在普遍条件下的存在性. 以上考虑仅是从数学出发, 对 n 值无任何限制. 在使用本方法的过程中, 注意保持 Q 和 $E_j \geq 1.2$, 从未遇到过 W_n 和 $C_{n,n}$ 无解的情况.

4 系数矩阵与变换矩阵的构造与性质

综上所述, 系数矩阵主对角元的优化有利于 W_n 及变换矩阵 $C_{n,n}$ 的存在. 考虑到: 1) 颗粒形散函数对模型及其系数矩阵影响最大. 2) 从“去污染变换的不变性”出发, 不同模型的系数矩阵即使达到相同的主元优化程度, 所需约束条件及操作方法也繁简不一. 3) 质球颗粒模型中系数矩阵主元优化有最为简明的定量约束关系可循^[2], 即

$$S_j \times R_{im} = \sqrt{5}, \quad (12)$$

($R_{im} = (R_{i-1} + R_i)/2$). 4) 常规所用积分变换方法去除狭缝污染^[10]亦以匀质球颗粒为例证明其方法的成功; 选择同一模型有利于两种方法进行比较. 因而我们选用匀质球颗粒模型计算 $C_{n,n}$.

我们所用的中子小角谱仪, 在图 1 所示狭缝系统权重函数 $F(t)$ 下, 不妨将模型取成: ①匀质球形颗粒的形散函数^[5]为 $\Phi(S, R) = 3 \times [\sin(SR) - SR \cos(SR)] / (SR)^3$; ②粒度分割区间为 1-3-6-9-15.5-23-30nm, 共 6 个区间; ③对应观测角度 S 为 0.118, 0.052, 0.028, 0.017, 0.012, 0.009, 共 6 点. 代入(3), (4)和(5)式计算, 结果如下:

$$A_{6,6} = 10^6 \times \begin{vmatrix} 1.71 & 0.711 & 0.447 & 0.506 & 0.429 & 0.335 \\ 6.81 & 33.1 & 10.1 & 13.8 & 9.9 & 9.8 \\ 8.59 & 91.6 & 258 & 129 & 108 & 671 \\ 9.17 & 119 & 588 & 1380 & 963 & 264 \\ 9.27 & 128 & 715 & 2330 & 3430 & 2210 \\ 9.37 & 132 & 795 & 3060 & 6360 & 8500 \end{vmatrix}; \quad (13)$$

$$a_{6,6} = 10^3 \times \begin{vmatrix} 4.01 & 1.68 & 1.04 & 1.19 & 1.02 & 0.79 \\ 16.0 & 81.5 & 26.4 & 35.2 & 24.2 & 23.6 \\ 20.2 & 225 & 709 & 444 & 257 & 200 \\ 21.4 & 293 & 1600 & 4610 & 4340 & 630 \\ 21.8 & 313 & 1940 & 7620 & 14600 & 13800 \\ 22.1 & 324 & 2150 & 9930 & 26500 & 47300 \end{vmatrix}; \quad (14)$$

$$C_{6,6} = \begin{vmatrix} 2.35 \text{ e-} 3 & 2.12 \text{ e-} 7 & 8.95 \text{ e-} 8 & -4.93 \text{ e-} 8 & 2.46 \text{ e-} 8 & -5.45 \text{ e-} 9 \\ -3.88 \text{ e-} 4 & 2.42 \text{ e-} 3 & 1.93 \text{ e-} 5 & -1.97 \text{ e-} 6 & 4.41 \text{ e-} 7 & -2.07 \text{ e-} 7 \\ 6.29 \text{ e-} 4 & -4.54 \text{ e-} 4 & 2.42 \text{ e-} 3 & 2.49 \text{ e-} 4 & -1.25 \text{ e-} 4 & 2.95 \text{ e-} 5 \\ -3.56 \text{ e-} 4 & 2.41 \text{ e-} 4 & -6.10 \text{ e-} 4 & 1.67 \text{ e-} 3 & 1.48 \text{ e-} 3 & -3.58 \text{ e-} 4 \\ 1.05 \text{ e-} 4 & -6.99 \text{ e-} 5 & 1.41 \text{ e-} 4 & -2.10 \text{ e-} 3 & 3.68 \text{ e-} 3 & 6.39 \text{ e-} 4 \\ -2.11 \text{ e-} 4 & 1.41 \text{ e-} 4 & -2.85 \text{ e-} 4 & 1.06 \text{ e-} 3 & -5.50 \text{ e-} 3 & 6.96 \text{ e-} 3 \end{vmatrix}. \quad (15)$$

对应于其他角度的模型可在此基础上由(12)式导出.

在实际计算过程中,我们所遇到的 $C_{n,n}$ 主对角元高度优化但彼此不相等,非对角主元只有部分为零,所以每个无污染强度值 i_n 及其误差不仅与相同角度的,而且与相邻角度的污染强度值 I_n 及其误差都不等地相关.因为污染强度值 I_n 带有测量误差, $C_{n,n}$ 与 $U_{n,n}$ 的这些差异会在进行去污染变换时,在 i_n 和 I_n 之间引入不同测量角度不同量级误差的组合传递.所以要使 $C_{n,n}$ 在给定的 $F(t)$ 下,尽可能地接近 $U_{n,n}$.方法是按(12)式合理调节测量角度 θ_j 和积分区间 $[R_{i-1}, R_i]$ 使得系数矩阵主对角元尽可能优化^[2].模拟计算表明:1)系数矩阵主元的优化程度越高,各行优化程度越均匀, $C_{n,n}$ 就越接近于 $U_{n,n}$.但这种逼近是有限度的,因为 $C_{n,n}$ 毕竟反映的是实际存在的谱仪准直系统的畸变污染情况.2)比较对应的 $a_{n,n}$ 和 $A_{n,n}$ 可发现,越靠近角度零点优化程度越低.3)减少矩阵阶数可以极大地改善系数矩阵主对角元的优化程度.

例如当 $n=6$ 时,无论怎样优化 $a_{n,n}$ 矩阵;所得 $C_{n,n}$ 阵元中主对角元 $C_{j,j}$ 部分是高度优化的,但彼此并不相等. $C_{j,j}$ (矩阵的右上角部分)为零;而特殊之处在于 $C_{j,j}$ (矩阵的左下角部分)明显不为零,个别的阵元较大(见(13), (14)式).通过分析发现,在去污染过程中,这些较大的 $C_{j,j}$ 阵元所乘的有污染强度 I_j 恰恰是(位于较大观测角度)绝对数值较小的几个.因而无污染强度 i_j 及其误差 $(\delta i)_j$ 仍主要地由对应的 $C_{j,j}$ 和 I_j 决定,这有利于减少误差组合传递.当取 $n=4$,而且这4个观测点就取在 $n=6$ 中的任意4个点上时,上述特点依旧且两者的变换结果完全一致.从去污染的过程可知误差的传递如下:

$$(\delta i)_n = a_{n,n} \times (\delta W)_n = a_{n,n} \times (A_{n,n})^{-1} \times (\delta I)_n = C_{n,n} \times (\delta I)_n. \quad (16)$$

在分割分布函数法中,系数矩阵 $A_{n,n}$ 保持 $Q \geq 2$ 可使 W_n 的求解误差 $(\delta W)_n$ 不大于强度 I_n 的测量误差 $(\delta I)_n^{[9]}$. 所以无论考虑到有利于 $C_{n,n}$ 的存在,或是在去污染计算中要尽量抑制误差组合传递,都要求系数矩阵主元尽可能优化. 我们取矩阵阶数 n 为能够保持 $Q \approx 1.2$ 和 $E_j \approx 1.2$ 的最大阶数值,在我们所用谱仪的条件下,一般 $n \leq 8$. 需要明确:对 n 取值的限制,是狭缝畸变污染的必然结果;也是保证去除污染计算精度的根本要求. 在此基础上,随着在不同角度使用相应的 $C_{n,n}$, 总结果将趋近一条连续曲线(见图 3). 如果试图一次去除尽可能多个点的狭缝污染,而对 n 不加限制,将导致 $C_{n,n}$ 不存在或去污染结果精度恶化的后果,使之得不偿失.

5 与常规去污染方法的比较

对采用狭缝准直系统并引起污染的谱仪来讲,在效应曲线测量中角度步进量必须大于谱仪的角分辨率 $\Delta\theta$ 才有意义. 谱仪最小和最大可测角度 $\theta_{\min}$ 和 $\theta_{\max}$ 是确定的参数,所以观测点数 n 总是有限的,至少要满足

$$n \leq (\theta_{\max} - \theta_{\min})/(\Delta\theta), \quad (17)$$

使用矩阵这种离散变换形式去污染是符合实际情况的.

如果想由连续的污染曲线 $I(S)$ 得到连续的无污染曲线 $i(S)$, 则一般要由下面的方程组出发^[15-17]:

$$I_1(h) = 2 \times \int_0^\infty H(t) \times i[\sqrt{h^2 + (2\pi t/\lambda)^2}] dt, \quad (18)$$

$$I(S) = \int_{-\infty}^\infty G(t) \times I_1(t - S) dt, \quad (19)$$

因为 $F(t) = H(t) * G(t)$, 所以将(18)式代入(19)式之中易得

$$I(S) = \int_0^\infty F(t) \times i[\sqrt{S^2 + (2\pi t/\lambda)^2}] dt. \quad (20)$$

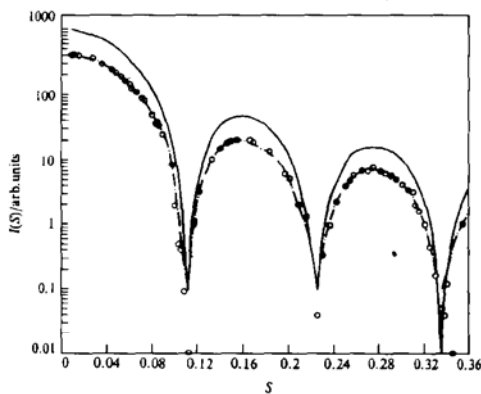


图 3 狭缝畸变后的匀质球形颗粒形散函数(以○和—分别表示矩阵和积分运算的结果)和理想准直条件下的结果(以——表示)

通过解积分方程(20)得到 $i(S)$. 显然在 $G(t)$, $H(t)$ 和 $I(S)$ 一般没有解析的函数表达式的情况下,由(18)到(20)式对 $i(S)$ 的加畸变污染计算相对简单,可用计算机迅速地完成. 反之,由(20)式求解 $i(S)$ 则技巧性强且计算量大^[10]. 从求解原理上讲,它与本文所提出的矩阵去污染方法完全等价^[5]. 比较(6), (7)和(20)式可知,本文所提矩阵算法不过是对 $i(S, t)$ 假设了某种模型并进行多次少量离散点强度拟合,之后用矩阵求逆代替常规的退卷积和退定积分运算而已. 为与常规方法^[10]比较,加之矩阵可以方便地进行正逆运算,我们以理想准直条件下的

匀质球形颗粒形散函数为 $i(S)$, 引入本谱仪狭缝准直系统权重函数 $F(t)$ (见图 2) 构造矩阵, 依(7)式进行了 12 次、每次 5 点的加畸变污染处理, 而后再依照(18)式到(20)式对 $i(S)$ 进行积分变换, 通过比较两者的结果, 从反面比较验证矩阵算法的可靠性. 由图 3 可知, 两者吻合良好, 平均相对误差小于 5%.

6 实际应用

我们应用此方法求取并比较了岩石样品在有污染和理想条件下的分形维数和颗粒(孔洞)尺度分布(见图 2, 图 3). 由于在对样品散射强度和观测角度取双对数后两者在某一角域内呈直线关系, 直线的斜率 K 定量地反映了样品基体与孔洞内界面的分形维数 D (当 $K > 3$ 时, 则 $D = 6 - K$). 由图 4 可看出, 进行去污染处理前后, 直线斜率有明显不同, 即如果不进行去污染处理, 所得面分形维数将明显偏高.

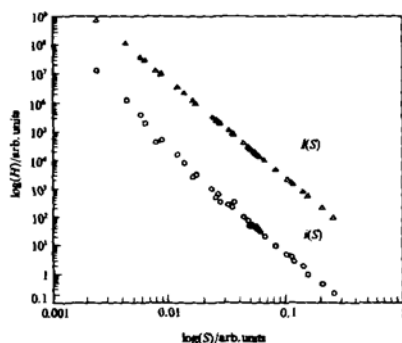


图 4 去污染前后, 江汉油田砂岩样品的散射强度曲线(Δ 代表有污染, $D=2.6$; $\circ$ 代表无污染, $D=2.4$)

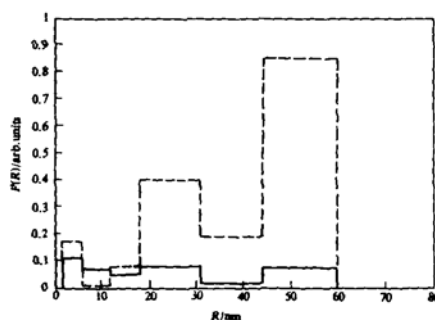


图 5 大庆油田 No. 16 泥岩样品的粒度分布直方图 $P(R)$, 受狭缝污染的影响(实线和虚线依次表示在狭缝准直和理想准直条件下的结果)

另外, 对标准样品 Ni 粉, 用本文所提的由(1)式到(9)式的整套公式进行模拟计算, 验证了各个结论的正确性. 尤其是在反复迭代下, $i_n(S)$ 的精度令人满意.

7 结 论

本方法的提出源于我们所使用中子小角散射谱仪准直系统的特殊性: 诸如采用入射、样品和接收三狭缝准直, 狭缝参数依次为 20×6 mm, 20×3.5 mm 和 20×6 mm, 间距为 1.5 m 和 1.5 m 等等, 如图 1. 这些特点与 X 光小角散射谱仪经常使用的无限高四狭缝准直系统、Kratky 狭缝准直系统^[5], 以及常规中子小角谱仪明显不同. 但从原理上讲, 上述去污染矩阵算法亦可推广到任何非理想准直系统.

如同谱仪准直系统权重函数 $F(t)$ 一样, 小角谱仪角分辨率也是仪器的基本参数之一. 采用狭缝准直系统所损失的角分辨率, 是任何去污染方法都不可能弥补的. 如果具备

了强大的计算能力^[10],那么采用常规积分变换方法去除狭缝准直系统畸变污染是最佳选择.矩阵变换方法仅仅是前者的一种简化形式,尤其适用于污染严重的少量离散点去污染处理.与常规去污染方法相比,计算量小,精度容易控制,使用灵活.

- [1] O. Glatter and O. Kratky, *et al.*, Small Angle X-ray Scattering, Academic Press Inc. (London) Ltd., 1982.
- [2] 张晋远,理学 X 射线衍射仪用户协会论文选集,4(1991).
- [3] I. Simon, *J. Appl. Cryst.*, 4(1971), 317.
- [4] R. W. Hendricks and P. W. Schmidt, *Acta Physica*, Band 26, Heft 2-3 (1967), 97.
- [5] 黄胜涛,固体 X 射线衍射学, (北京:高等教育出版社, 1990)
- [6] K. L. Yudowitch, *J. Appl. Phys.*, 20(1949), 174.
- [7] O. Glatter, *J. Appl. Cryst.*, 13(1980), 7.
- [8] C. G. Vonk, *J. Appl. Cryst.*, 9(1976), 433.
- [9] 柳春兰、张晋远,粉末冶金技术,8(1990), 199-205
- [10] M. Deutsch and M. Luban, *J. Appl. Cryst.*, 11(1978), 87.
- [11] O. Glatter, *J. Appl. Cryst.*, 10(1977), 415.

A MATRIX METHOD DESMEARING THE DISTORTION CAUSED BY SLIT COLLIMATOR SYSTEM IN SMALL ANGLE SCATTERING

HE JIAN YANG TONG-HUA

(Thermal Neutron Scattering Laboratory, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413)

(Received 23 March 1995)

ABSTRACT

A new matrix desmearing method in small angle scattering (SAS) has been developed. The feasibility make it may be applied conveniently to all types of SAS spectrometer which have to use slit collimator system at the research reactor with low and medium flux. The experimental results show that the method is consistent with the ordinary desmearing method.

PACC: 6112E; 0760; 0620H