

# 反射情况下 X 射线衍射方程的 Green 函数解法

孙 长 德

(北京大学物理系)

1983 年 1 月 17 日收到

## 提 要

对半无穷厚晶体用推迟 Green 函数  $G^{(r)}$ , 解出 X 射线在反射情形下的场值  $D_h$ . 对有限厚晶体, 用  $G^{(r)}$  和超前 Green 函数  $G^{(a)}$  能类似地求解. 将这些结果与其它作者<sup>[1,4]</sup>用 Riemann 函数或 Fourier 积分得到的结果作了比较, 吻合是令人满意的.

对反射情况下 X 射线衍射理论和实验的研究较透射情况发展得晚一些. Uragami<sup>[1]</sup>首先对大块晶体利用 Riemann 函数法求出场值, 从理论和实验上计算与观察了 Pendellösung 条纹. 继之他又对有限尺寸晶体在考虑了边界影响之后导出  $m$  重反射结果<sup>[2,3]</sup>. 此后 Saka 等人<sup>[4-6]</sup>利用 Fourier 变换, 结合静相法也作了类似的工作.

本文利用 Green 函数法导出在大块晶体时的场值, 所得结果与 Uragami 的基本一致. 又从解方程的角度指出出现场值不同表达式的原因. 在考虑了有限尺寸晶体的边界条件后, 利用超前和推迟 Green 函数导出所谓  $m$  重反射问题, 并把这些结果与 Pinsker<sup>[7]</sup>的工作加以比较.

## 一、半无穷厚晶体的 Bragg 反射

在反射情况下, 也满足高木方程 (Takagi)

$$-i \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) D_0 = C \chi_h D_h, \quad (1)$$

$$-i \left( \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) D_h = -\alpha D_h + C \chi_h D_0. \quad (2)$$

这里变量之间仍满足关系式

$$S_0 = \frac{\lambda}{2\pi} (z + x), \quad S_h = \frac{\lambda}{2\pi} (z - x),$$

因而  $z$  方向表示样品表面,  $x$  表示厚度, 见图 1. 与 X 射线透射时刚好相反<sup>[8]</sup>. 按文献 [8] 的处理方法, (1) 和 (2) 式化为

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\alpha \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) + \chi^2 \right] D_j = 0 \quad (j = 0, h), \quad (3)$$

令

$$D_j = e^{\frac{i\alpha}{2}(x-z)} v_j(z, x), \quad (4)$$

有

$$\frac{\partial^2 v_j}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v_j}{\partial z^2} - \chi^2 v_j = 0. \quad (5)$$

假定  $x$  很厚, 则此半无界的 Green 函数基本解

$$G_0(\xi - x, \zeta - z) = -\frac{1}{2} J_0(\chi \sqrt{(\zeta - z)^2 - (\xi - x)^2}) \times \theta(\xi - x) \theta(\xi - x - |\zeta - z|), \quad (6)$$

其中的  $\theta$  函数表成不等式为

$$x \leq z - \zeta + \xi, \quad (6.1)$$

$$x \leq -z + \zeta + \xi. \quad (6.2)$$

(6.1), (6.2) 两式分别表征图 1 中的  $l_1, l_2$  直线,

两线交点为  $x = \xi, z = \zeta$ . 在阴影区域为  $G_0$  的源变量  $x, z$  的取值范围, 其对面的区域为场分布区域.

仿透射 X 射线时<sup>[8]</sup>解方程的作法求得

$$v_j(\xi, \zeta) = \iint [G \hat{L}_{z,x}(v_j) - v_j \hat{L}_{z,x}(G)] dx dz. \quad (7)$$

对 (7) 式的积分也选在阴影区域, 但因  $l_1, l_2$  线对积分无贡献, 所以由 Green 定理化成的回路积分  $c$  只是指  $x = 0$  的样品表面. 令  $v_j(\xi, \zeta)$  取成  $v_h(\xi, \zeta)$ , 则有

$$\begin{aligned} v_h(\xi, \zeta) &= \int_c \left[ G \left( \frac{\partial v_h}{\partial z} dx + \frac{\partial v_h}{\partial x} dz \right) - v_h \left( \frac{\partial G}{\partial z} dx + \frac{\partial G}{\partial x} dz \right) \right] \\ &= \int_c \left[ G \frac{\partial v_h}{\partial x} dz - v_h \frac{\partial G}{\partial x} dz \right] \\ &= \int_c \left[ -iC\chi_h G v_0 + \left( i\alpha G - \frac{\partial G}{\partial z} - \frac{\partial G}{\partial x} \right) \left( -\frac{i}{C\chi_h} \frac{\partial v_0}{\partial z} \right) \right] dz. \quad (8) \end{aligned}$$

在 (8) 式含有的  $\frac{\partial G}{\partial z}, \frac{\partial G}{\partial x}$ , 以及将出现的  $\frac{\partial J_0}{\partial z}, \frac{\partial J_0}{\partial x}$ , 其计算方法与结果均同于透射 X 射线情况<sup>[8]</sup>, 这里不赘述, 而直接引进

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial z} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial J_0(\chi \sqrt{(\zeta - z)^2 - (\xi - x)^2})}{\partial z} \theta(\xi - x) \theta(\xi - x - |\zeta - z|) \\ &\quad - \frac{1}{2} \delta(\zeta - z - (\xi - x)) - \frac{1}{2} (\zeta - z + (\xi - x)), \end{aligned}$$

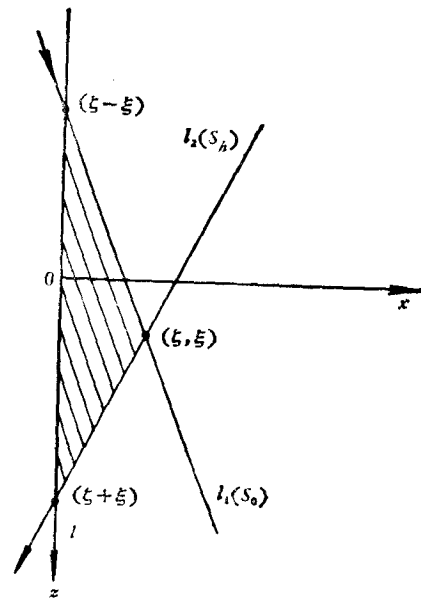


图 1 半无穷晶体反射示意图

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial x} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial J_0(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2})}{\partial x} \theta(\xi-x)\theta(\xi-x-|\zeta-z|) \\ &\quad - \frac{1}{2} \delta(\xi-x - (\zeta-z)) - \frac{1}{2} \delta(\xi-x + (\zeta-z)), \\ \frac{\partial J_0(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2})}{\partial z} &= \frac{\chi(\zeta-z)}{\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2}} J_1(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2}), \\ \frac{\partial J_0(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2})}{\partial x} &= -\frac{\chi(\xi-x)}{\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2}} J_1(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2}). \end{aligned}$$

又从(4)式给出边条件为

$$v_0(0, z) = e^{-\frac{i\alpha}{2}z} D_0(0, z) = \delta(z)$$

(取  $z$  线上的入射场  $D_0(0, z) = e^{-\frac{i\alpha}{2}z} \delta(z)$ ), 这样

$$\begin{aligned} v_h(\xi, \zeta) &= \int_1 \left\{ -iC\chi_h G v_0 dz + \frac{\alpha}{C\chi_h} G \frac{\partial v_0}{\partial z} dz \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{C\chi_h} \frac{\partial v_0}{\partial z} \left[ -\delta(\xi-x + \zeta-z) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\chi}{2} \sqrt{\frac{(\zeta-z) - (\xi-x)}{(\zeta-z) + (\xi-x)}} J_1(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2}) \right] dz \right\} \\ &= \frac{i}{2} C\chi_h J_0(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) - \frac{\alpha}{2C\chi_h} \int_1 J_0(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - \xi^2}) \delta'(z) dz \\ &\quad - \frac{i\chi}{2C\chi_h} \int_1 \sqrt{\frac{\zeta-z-\xi}{\zeta-z+\xi}} J_1(\chi\sqrt{(\zeta-z)^2 - \xi^2}) \delta'(z) dz \\ &= \frac{iC\chi_h}{2} J_0(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) + \frac{\alpha\chi}{2C\chi_h} \frac{\zeta}{\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}} J_1(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) \\ &\quad - \frac{i\chi}{2C\chi_h \sqrt{\zeta^2 - \xi^2}} J_1(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) + \frac{iC\chi_h \zeta}{2(\zeta + \xi)} J_2(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}). \quad (9) \end{aligned}$$

在计算中用到了下列关系式:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(t) f(t) dt &= -f'(0), \\ \frac{d}{dx} [x^\nu z_\nu(x)] &= x^\nu z_{\nu-1}(x) \end{aligned}$$

以及

$$\int_1 \delta'(z) \delta(\xi-x + \zeta-z) dz = 0, \quad \chi^2 = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}.$$

为使(9)式中有关项合并, 利用关系

$$z_{\nu-1}(x) + z_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} z_\nu(x),$$

则可得

$$v_h(\xi, \zeta) = \frac{\chi^2(i + \alpha\zeta)}{4C\chi_h} J_0(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) + \left( \frac{\alpha\chi^2\zeta}{4C\chi_h} + \frac{i\chi^2(\zeta - \xi)}{4C\chi_h(\zeta + \xi)} \right) J_2(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}).$$

下面再根据 (4) 式把  $v_h(\xi, \zeta)$  变成  $D_h(\xi, \zeta)$ , 则有

$$\begin{aligned} D_h(\xi, \zeta) &= e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta-\xi)} v_h(\xi, \zeta) \\ &= e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta-\xi)} \left[ \frac{\chi^2(i+\alpha\zeta)}{4C\chi_h} J_0 + \left( \frac{\alpha\chi^2}{4C\chi_h} \zeta + \frac{i\chi^2(\zeta-\xi)}{4C\chi_h(\zeta+\xi)} \right) J_2 \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

当  $\xi \rightarrow 0$  时, 将 (10) 式变成  $J_1$  函数则有

$$D_h(0, \zeta) = e^{-\frac{i\alpha}{2}\zeta} \left( \frac{i\chi}{2C\chi_h\zeta} J_1 + \frac{\alpha}{2} J_1 \right). \quad (11)$$

(10) 式是场点  $(\xi, \zeta)$  处在接近晶体表面的晶体内部的反射场值, (11) 式是在晶体入射表面上的反射场值.

同理, 对透射场  $D_0$ , 只要在 (7) 式中取  $v_i(\xi, \zeta)$  为  $v_0(\xi, \zeta)$ , 则可得

$$\begin{aligned} v_0(\xi, \zeta) &= \int_c \left[ G \left( \frac{\partial v_0}{\partial z} dx + \frac{\partial v_0}{\partial x} dz \right) - v_0 \left( \frac{\partial G}{\partial z} dx + \frac{\partial G}{\partial x} dz \right) \right] \\ &= \int_c \left[ G \frac{\partial v_0}{\partial x} dz - v_0 \frac{\partial G}{\partial x} dz \right]. \end{aligned}$$

因在  $x=0$  的样品表面上 (即  $l$  线上)  $v_0(0, z) = \delta(z)$  与  $x$  无关, 所以  $\partial v_0/\partial x = 0$ , 将  $\partial G/\partial x$  代入, 经计算可得

$$v_0(\xi, \zeta) = -\frac{1}{2} \frac{\chi\xi}{\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}} J_1(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) + \frac{1}{2} \delta(\xi - \zeta) + \frac{1}{2} \delta(\xi + \zeta),$$

亦即

$$\begin{aligned} D_0(\xi, \zeta) &= e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta-\xi)} \left[ \frac{1}{2} \delta(\xi - \zeta) + \frac{1}{2} \delta(\xi + \zeta) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{\chi\xi}{\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}} J_1(\chi\sqrt{\zeta^2 - \xi^2}) \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

此即与 (10) 式相对应的透射场值. 由  $S_0, S_h$  与  $\xi, \zeta$  之间的变换关系不难验证这个结果与 Uragami<sup>[1]</sup> 的 (31) 式基本相同.

当  $\xi \rightarrow 0$  时, (12) 式中两个  $\delta$  函数分别考虑, 再合并得

$$D_0(0, \zeta) = e^{-\frac{i\alpha}{2}\zeta} \delta(\zeta). \quad (13)$$

(13) 式表示在入射表面  $\zeta$  上的入射场边值. 它与 (11) 式的反射场值相对应. 从数学上看, (11), (13) 两式是 (10), (12) 两式在  $\xi \rightarrow 0$  时的近似; 从物理上看, 实验上测定的反射波的强度间隔 (或  $J_1$  函数的 0 点间隔) 正是在 (13) 式所描述的入射场下对 (11) 式给出的  $J_1$  函数的验证.

## 二、有限厚晶体的反射及 $m$ 重反射

晶体在  $x$  方向上有有限厚度, 因而与前述的边条件不同. 这里令

$$D_0^{(a)}(0, z) = \delta(z) \quad x = 0, \quad (14)$$

$$D_h^{(a)}(t, z) = 0 \quad x = t, \quad (15)$$

在  $z$  线上 ( $l$  线) Green 函数的基本解:

$$G_0^{(r)}(\xi - x, \zeta - z) = e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta - z - (\xi - x))} \frac{-1}{2} J_0(\chi \sqrt{(\zeta - z)^2 - (\xi - x)^2}) \times \theta(\xi - x) \theta(\xi - x - |\zeta - z|); \quad (16)$$

$$G_0^{(a)}(\xi - x, \zeta - z) = e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta - z - (\xi - x))} \frac{1}{2} J_0(\chi \sqrt{(\zeta - z)^2 - (\xi - x)^2}) \times \theta(x - \xi) \theta(x - \xi - |\zeta - z|). \quad (17)$$

从 (16) 式的  $\theta$  函数得出  $\xi - \zeta + z > x$ ,  $\xi + \zeta - z > x$ , 当两不等式取等号时, 得出图 2 的  $l_1, l_2$  线, 其阴影区 I 即为  $G_0^{(r)}$  源变量的取值区域, 对应的场值在 II 区取值. 相反从 (17) 式的  $\theta$  函数得出的不等式为  $\xi + \zeta - z < x$ ,  $\xi - \zeta + z < x$ . 它确定的  $G_0^{(a)}$  源变量取值区域为 II 区, 对应的场值在 I 区, 刚好与  $G_0^{(r)}$  相反.

解方程的步骤同文献 [8], 在经过 Green 公式将面积分化为迴路积分后, 积分路径只取  $z$  线 ( $l_1, l_2$  贡献为零), 且因边条件 (15) 式, 说明入射波  $D_0^{(a)}$  在 II 区  $x = t$  线上的衍射场值  $D_h(t, z)$  为零, 因而只求它在 II 区的透射场  $D_0$  值.

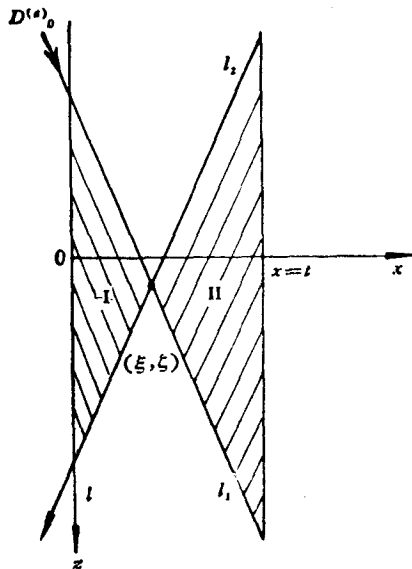


图 2  $G^{(r)}$  与  $G^{(a)}$  的源变量取值区域

再将 II 区的  $D_0$  (18) 式, 结合  $G^{(a)}$ , 求出在 I 区

的  $D_h$  场值, 即所求样品的反射场值为

$$D_0(t, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \left[ D_0 \frac{\partial G^{(r)}}{\partial x'} - G^{(r)} \frac{\partial D_0}{\partial x'} + i\alpha G^{(r)} D_0 \right]_{x'=t} \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \left[ D_0^{(a)} \left( \frac{\partial G^{(r)}}{\partial x'} - \frac{\partial G^{(r)}}{\partial z'} \right) + G^{(r)} (i\alpha D_0^{(a)} - iC\chi_h D_h) \right]_{x'=t}, \quad (18)$$

$$D_h(\xi, \zeta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left( D_h \frac{\partial G^{(a)}}{\partial x} - G^{(a)} \frac{\partial D_h}{\partial x} + iG^{(a)} D_h \right) \Big|_{x=t} \\ = -iC\chi_h \int_{-\infty}^{+\infty} G^{(a)} D_0(t, z) dz. \quad (19)$$

如将 (18) 式代入 (19) 式, 则是个积分方程, 一般求解相当繁琐, 可参阅文献 [7]. 这里为简明计, 摘引其结果, 以供后面讨论.

当  $\xi \rightarrow 0$  (即求  $z$  线上的场),

$$D_h(0, \zeta) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^{(B)}(\zeta - z) D_0^{(a)}(z) dz; \quad (20) \\ G^{(B)}(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G^{(B)}(\alpha) \exp(i\alpha\zeta) d\alpha$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i\chi_h C}{2} e^{-\frac{i\alpha}{2}\zeta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n, n+1} (-1)^m \left( \frac{\zeta - 2tm}{\zeta + 2tm} \right)^n \\
&\quad \cdot \left[ J_{2n}(\chi\sqrt{\zeta^2 - (2tm)^2}) + \frac{\zeta - 2tm}{\zeta + 2tm} J_{2n+2}(\chi\sqrt{\zeta^2 - (2tm)^2}) \right] \\
&\quad \cdot \theta(\zeta - 2tm). \tag{21}
\end{aligned}$$

当  $t \rightarrow \infty$ , 只保留  $n = 0$  项,

$$\begin{aligned}
G^{(B)}(\zeta)|_{t \rightarrow \infty} &= \frac{i\chi_h C}{2} e^{-\frac{i\alpha}{2}\zeta} (J_0(\chi\zeta) + J_2(\chi\zeta))\theta(\zeta) \\
&= e^{-\frac{i\alpha}{2}\zeta} \frac{i}{C\chi_h \zeta} J_1(\chi\zeta)\theta(\zeta). \tag{22}
\end{aligned}$$

如在  $x = 0$  的线上入射场  $D_0^{(A)}(z)$  取  $\delta(z)$ , 将 (22) 式代入 (20) 式, 可见  $D_h(0, \zeta)$  也取 (22) 式的形式.

### 三、讨 论

1. 从半无穷厚晶体利用 Green 函数求解的 Bragg 情形下的  $D_h$  值, 当场点靠近入射表面但仍在晶体内部时为 (10) 式. 当场点在入射表面上时 ( $\xi \rightarrow 0$ )  $D_h$  为 (11) 式. 本文的 (10), (11) 式与 Uragami<sup>[1]</sup> 的 (32), (34) 式比较, 后者均缺少  $e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta-\xi)}$  项, 另外在 (32) 式中还少了些含  $\zeta$  变量的项. 这个差别可解释如下: Uragami 视方程中的  $\beta_h = 0$ , 因而他解的是

$$\frac{\partial^2 v}{\partial S_0 \partial S_h} + \Pi^2 K^2 C^2 \chi_h \chi_h v = 0,$$

本文把  $\beta_h$  看成非零的常系数, 解的是 (3) 式. 所以他的解少了  $e^{-\frac{i\alpha}{2}(\zeta-\xi)}$  项. 同样, 由于原始方程不同, 所以他又少了些含变量  $\zeta$  的项. 但当作  $\xi \rightarrow 0$  的近似后, (34) 式与本文的 (11) 式相同. (本文中的  $\alpha$  相当于  $\beta_h$ , 若取  $\alpha = 0$ , 即如是.)

2. Uragami<sup>[2,3]</sup> 按入射线走的路径把有限厚晶体连续地分成许多区域, 然后对每个区域实行 Riemann 方法处理; Saka 等人<sup>[5,6]</sup> 基本上也是这样的设想, 只是利用了 Fourier 展开和静相法, 引进虚表面、虚反射等概念. 这些都应视为不同的解题方法. 严格从物理概念上推敲, 追踪一根光线的  $m$  次连续反射, 并不是处理场问题的正常途径. 而本文利用 Green 函数求解, 较之简易, 特别是处理有限晶体的多重反射时, 在物理概念上是严谨的. 可以看出, 当  $\xi \rightarrow 0$  时, 如入射场取  $D_0^{(A)}(z) = \delta(z)$ , 则  $D_h(\zeta)$  类似于 (21) 式, 即是  $J_{2n}$  与  $J_{2n+2}$  的级数和. 这个结果与 Uragami 以及 Saka 等人<sup>[6]</sup> 的结果相符, 可参照文献 [6] 的 (23c) 式及表 4.

3. 对半无穷厚晶体用推迟 Green 函数  $G^{(r)}$  求解得出 (10) 式, 当  $\xi \rightarrow 0$ , 由 (10) 式推出 (11) 式. 对有限厚晶体利用  $G^{(r)}$  与超前 Green 函数  $G^{(a)}$  求解, 可以得出如 Pinsker<sup>[7]</sup> 给出的  $J_{2n}$  与  $J_{2n+2}$  级数和的形式. Pinsker 只处理有限厚晶体的解, 并在当  $\xi \rightarrow 0$ ,  $t \rightarrow \infty$  时得出近似式 (22). 此式与本文的 (11) 式基本相同, 但他却得不出本文的 (10) 式, 即不能给出在近于晶体表面处晶体内部的信息.

## 参 考 文 献

- [ 1 ] T. Uragami, *J. Phys. Soc. Jap.*, **27**(1969), 147.
- [ 2 ] ———, *ibid.*, **28**(1970), 1508.
- [ 3 ] ———, *ibid.*, **31**(1971), 1141.
- [ 4 ] T. Saka, T. Katagawa, N. Kato, *Acta Cryst. A*, **28**(1972), 102.
- [ 5 ] ———, *ibid.*, **28**(1972), 113.
- [ 6 ] ———, *ibid.*, **29**(1973), 192.
- [ 7 ] Z. G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals* by Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1978), 388.
- [ 8 ] 孙长德, 物理学报, **32**(1983), 982.

## SOLUTION OF THE EQUATION OF X-RAYS DIFFRACTION BY GREEN FUNCTION IN BRAGG CASE

SUN ZHANG-DE

(Department of Physics, Peking University)

### ABSTRACT

For a semi-infinite crystal, the expression for wave field of X-ray reflection,  $D_n$  is derived by the retarded Green function  $G^{(r)}$ . For a crystal with finite thickness it can be solved using  $G^{(r)}$  and advanced Green functions  $G^a$  as well. These results have been compared with previous results<sup>[1,4]</sup> obtained by using Riemann function or Fourier integral and it is found that they are in agreement quite well.