

“显微畸变”和“嵌镶碎化” 尺寸 X 射线分析

——近似函数图解法及曲线集

孟庆恩 张自诚

冶金部钢铁研究总院

1982. 11

“显微畸变”和“嵌镶碎化”尺寸X射线分析
——近似函数图解法及曲线集

编辑出版：冶金工业部钢铁研究总院

地 址：北 京 学 院 南 路 24 号

印 刷：仪器仪表工业局印刷室

工 本 费：1.50 元

TC1

N

出版说明

根据 1982 年冶金部钢铁研究总院召开的“X 射线衍射分析技术讲座”会议的意见，我们将“显微畸变”和“镶嵌碎化”尺寸 X 射线分析——近似函数图解法及整套标准分离曲线编辑成册，提供读者使用。书中第一部份叙述了近似函数图解法的原理、数据处理的具体步骤、重要公式的推导、标准分离曲线的制作原理、误差分析以及在实际工作中应该注意的问题等内容；第二部份是为近似函数图解法使用的整套标准分离曲线图，其中几何宽化校正曲线全套共九种，是我们在已有的五种曲线的基础上补齐而成的。另外，由于“畸变”和“碎化”两种宽化效应的 M，N 标准分离曲线在文献中可供使用的种类较少，远远不能满足实际工作的需要，因此，我们制作了三十五种单波法和三种双波法 M，N 标准分离曲线。这套曲线，是根据钢铁研究中的实际情况，考虑了常见的铁基合金马氏体钢、奥氏体钢和镍基合金以及一般实验室常用的 $\text{Cr}_{K\alpha}$ ， $\text{Co}_{K\alpha}$ ， $\text{Cu}_{K\alpha}$ ， $\text{Fe}_{K\alpha}$ 和 $\text{Mo}_{K\alpha}$ 五种辐射。基本上能够满足一般常规分析的需要。

上述曲线的制作均具有足够的精度，整个数据的计算是由电子计算机完成的。

本书在编写过程中，曾得到钢铁研究总院孙珍宝付总工程师和那宝魁付院长的热情指导和帮助，在此特致以衷心地感谢。

由于编写时间仓促，我们的水平也有限，书中定有不少缺点和错误，敬希读者指正。

一九八二年十一月

编 者

目 录

引 言

§1 由“显微畸变”和“嵌镶碎化”效应引起的衍射线形宽化机制	1
1.1 “嵌镶碎化”效应宽化机制	2
1.2 点阵“显微畸变”宽化机制	4
1.3 各种宽化因素之间的关系	4
§2 k_{a1} 和 k_{a2} 双重线的分离	5
2.1 双重线分离的 Rachinger 图解法	5
2.2 近似函数校正法	7
§3 模拟线形的近似函数类型的选择	9
3.1 尝试法	9
3.2 直线法	9
3.3 拟合离散度 S^2 判别法	10
3.4 积半比判别法	10
3.5 物理宽化函数 $f(x)$ 函数类型的判定	13
§4 几何宽化效应的分离	14
4.1 β 、 B_0 、 b_0 之关系式和 $\frac{\beta}{B_0} \sim \frac{b_0}{B_0}$ 关系曲线的制作	15
4.2 几何宽化效应分离的具体步骤	17
§5 “显微畸变”和“嵌镶碎化”两种效应的分离	17
5.1 “畸变”和“碎化”效应分离的基本关系式	18
5.2 柯西分布法	19
5.3 高斯分布法	19
5.4 Лисак 法	20
5.5 M 、 N 标准分离曲线的制作	22
5.6 M 、 N 标准分离曲线的使用	23
§6 “显微畸变”，“嵌镶碎化”尺寸和位错密度的计算	23
§7 近似函数图解法误差分析	24
7.1 物理宽化 β 的相对误差	25
7.2 M 、 N 分离的误差分析	27
附录 1 公式 $h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y)f(x-y)dy$ 的证明	30
附录 2 公式 $B = \frac{\beta b}{\pi + \alpha}$ 的推导	31

“显微畸变”和“嵌镶碎化”尺寸X射线分析

——近似函数图解法

引 言

多晶体材料，在冷加工，淬火或其它一些处理过程中，将引起基体点阵的显微畸变和相干散射区细化（或称嵌镶碎化，以下均用此词）。这种基体的显微亚结构与材料的力学、物理和化学性能都有着密切的关系，对基体有着明显的强化作用，同时对材料在时效过程中的组织结构变化也有着重要的影响。因此，分析和确定基体的“显微畸变”和“嵌镶碎化”尺寸的问题早已为人们所重视。进行这种分析可以采用电子显微镜技术直接进行观察，但是最为常规的方法还是X射线衍射分析法。利用这种方法可以对这两个物理量进行定量测量，并能给出统计地相对变化规律，避免了电子显微镜的局限性。日前较为常用的X射线衍射分析方法主要有：近似函数图解法（或称衍射线积分宽度法）；Warren——Averbach 付氏分析法和方差分析法等。其中近似函数图解法是比较常用的方法。就分析精度而言，不如付氏分析法，但它简便易行，并能给出满意的结果，尤其是能较好地反映出这两个物理量的相对变化规律。由于在我们所处理的实际问题中，绝大部分是研究这两个物理量随各种工艺制度的变化规律，或者是两种状态的相对比较，而不太注重它们的绝对值的大小，因此，近似函数图解法被广泛采用，并积累了不少经验，是一种比较成熟的方法。下面将依次介绍近似函数图解法的原理、基本关系式，数据处理步骤，标准校正曲线的制作和误差分析等几个方面的问题。

§ 1 由“显微畸变”和“嵌镶碎化”效应所引起的 衍射线形宽化机制

即使对于十分完整的多晶体材料，其衍射线也具有一定的宽度。这是由于在实验中所使用X光管焦斑并不是理想的几何线，而是具有一定的宽度，入射X射线也不是理想的平行光束，它也具有一定的发散度；平板试样引起的散聚焦以及检测和记录系统实验条件等原因都能造成谱线宽化。我们把这种宽化，统称为仪器宽化或几何宽化。它的大小可以通过没有任何物理宽化效应的标准试样谱线的积分宽度来确定。所谓物理宽化，是指由试样的组织结构状态这种物理因素所引起的宽化，它是“显微畸变”和“嵌镶碎化”两种效应共同作用的结果（暂不考虑层错的作用）。

衍射谱线的宽化程度，通常是采用半高宽和劳厄积分宽度（简称积分宽度）这两个参量

来度量。半高宽的定义是：衍射线极大值一半处的宽度；而积分宽度的定义是：谱线的积分强度除以极大值。在作定量处理时，一般都采用积分宽度来表示谱线的宽化程度。现在我们来分别讨论物理宽化中两种效应的宽化机制以及各种宽化因素之间的关系。

1.1 “嵌镶碎化”效应宽化机制

在X射线衍射强度理论中，只要分析一下劳厄干涉函数的特征便可以知道，对于微小晶体，当它们的尺度很小($\leq 10^{-5}$ cm)时，其对应的倒易点均弥散为具有一定大小的区域。这些倒易点所引起的反射，不仅存在于一个单一的几何方向上，而是在一定的角度范围内发生。这个角度范围的大小与晶体的尺度有关。晶体尺度越小，弥散的角度范围越大。对于由大量无序取向的这种小晶粒所组成的多晶材料来说，由于它们所对应的每一个倒易点都弥散为一个小区域，那么，原半径为 $\frac{S}{2\pi}$ 的倒易球面（倒易矢量以 $\frac{1}{2\pi}$ 为单位），此时就变成了具有一定厚度的倒易球壳。当它与参考球相交时，就使得衍射圆锥具有一定的厚度，从而记录的衍射谱线就出现宽化现象，参见图1。这就是“嵌镶碎化”宽化机制简单的定性解释。下面从干涉函数这个概念出发对这种宽化效应进行定量讨论，并导出有名的Scherrer公式。

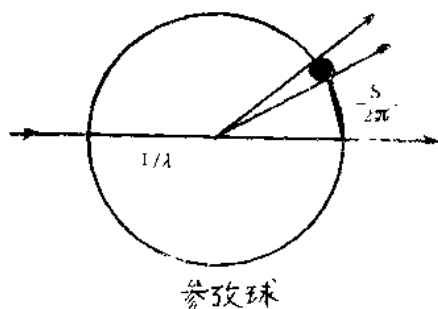


图1 “碎化”宽化示意图

我们知道，在微小晶体的情形中，倒易点所弥散区域的形状，仅由微小晶体的形状所决定，而与其点阵类型无关。这就意味着劳厄干涉函数 L 具有周期性，并且在每一个阵点附近以同样的形式分布着。在多晶体中，在具有“碎化”效应的情况下，衍射线强度的空间分布仅取决于倒易点绕其原点在各个方向转动而产生的干涉函数的平均值 $\bar{L}$ ，它是 $\frac{S}{2\pi}$ 的函数。

在 $\frac{S}{2\pi}$ 方向上倒易点弥散情况反映着劳厄干涉

函数的分布情况，它决定了在 2θ 坐标上谱线的强度分布特征，也就是说“碎化”宽化函数 $M(x)$ 与平均劳厄干涉函数 $L(S)$ 的特征是一致的。根据积分宽度的定义，在空间中由于这种效应所引起的劳厄干涉函数的宽化 $\Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right)$ 等于：

$$\Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right) = \frac{\int L\left(\frac{S}{2\pi}\right) d\left(\frac{S}{2\pi}\right)}{L_m} \quad (1)$$

式中， L_m 为 $L\left(\frac{S}{2\pi}\right)$ 的极大值。

在 2θ 坐标上，谱线宽化即积分宽度 $\Delta(2\theta)$ 等于

$$\Delta(2\theta) = \int M(2\theta) d(2\theta) \quad (2)$$

$$\text{因为 } \frac{S}{2\pi} = \frac{2\sin\theta}{\lambda}$$

$$\text{所以 } \Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right) = \frac{\cos\theta}{\lambda} \Delta(2\theta)$$

$$\text{则 } \Delta(2\theta) = \frac{\lambda}{\cos\theta} \Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right) \quad (3)$$

由于 $\Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right)$ 是倒易点在 $\frac{S}{2\pi}$ 方向上弥散的尺度, 它应与小晶粒在衍射面 (hkl) 法线方向的尺度 D_{hkl} 成反比, 即可表示成 $\Delta\left(\frac{S}{2\pi}\right) = \frac{K}{D_{hkl}}$, 其中系数 K 取决于干涉函数的分布特征, 因此, 对于一定形状的微小晶体来说它是一个常数。从而 (3) 式变为:

$$\Delta(2\theta) = \frac{K\lambda}{D_{hkl}\cos\theta} \quad (4)$$

(4) 式中各物理量的含义是很明确的, D 和 θ 都与所测晶面对应, 亦即 D_{hkl} 为 (hkl) 晶面法线方向上晶粒的尺寸。此时谱线宽化仅由“碎化”效应引起, 因此, $\Delta(2\theta)$ 改用“碎化”宽化函数的积分宽度 (以下简称“碎化”宽化) m_{hkl} 表示, 则 (4) 式可改写成:

$$m_{hkl} = \frac{K\lambda}{D_{hkl}\cos\theta_{hkl}} \quad (5)$$

$$\text{或 } D_{hkl} = \frac{K\lambda}{m_{hkl}\cos\theta_{hkl}} \quad (6)$$

其中 m_{hkl} 单位为弧度, D_{hkl} 与波长单位一致。这就是有名的 Scherrer 公式^[1], 它适用于各种晶系^[2]。在实际应用中常数 K 的值近似地取 1。对应于各种形状的小晶体和所测定的晶面, 其 K 值列于表 1。

表 1 不同形状的微小晶体和不同晶面的 K 值^[3]

晶 面 (hkl)	晶 粒 形 状			
	立 方 体	四 面 体	八 面 体	球 形
110	1.00	1.3867	1.1006	1.0747
110	1.0607	0.9806	1.0376	"
111	1.5547	1.2009	1.1438	"
210	1.0733	1.2403	1.1075	"
211	1.1527	1.1323	1.1061	"
221	1.1429	1.1556	1.1185	"
310	1.0672	1.3156	1.1138	"

1.2 点阵“显微畸变”宽化机制

所谓点阵“显微畸变”或称第二类畸变是存在于亚晶之间或几个嵌镶块之间的不均匀畸变。用 x 射线法所测量的畸变，是在被照射的体积内，畸变绝对值的统计平均值。

假设试样中只存在“显微畸变”而无“嵌镶碎化”效应，那么可以想象，在一个晶块内或晶块之间由于点阵畸变将引起晶面间距发生变化，甚至会使某些晶面发生弯曲。这样，晶面间距由 d_{hkl} 变成为 $d_{hkl} \pm \Delta d$ 。因为 Δd 是一个很小的量，并且不是一个常数，所以在各个晶块之间可能有较大的差别。因而使得衍射线强度分布在 $\theta_{hkl} \pm \Delta\theta$ 之间，造成谱线宽化。另外由于点阵的显微畸变是极不均匀的，其大小服从统计规律，而且没有方向性，因此谱线是对称宽化，峰值位置并不改变。由“畸变”效应引起的谱线宽化函数 $N(x)$ ，($x = 2\theta$)，与应变 $(\varepsilon = \frac{\Delta d}{d})$ 分布函数具有相同的特征。

根据布拉格定律，对于某一晶面族 $\{hkl\}$ 来说，由于晶面间距的变化 Δd 而引起的衍射角的变化 $\Delta\theta$ 为：

$$\Delta\theta = -\operatorname{tg}\theta \frac{\Delta d}{d} \quad (7)$$

采用 2θ 坐标，令 $\varepsilon = \frac{\Delta d}{d}$ ，并只考虑其绝对值的大小则 (7) 式变为

$$\Delta(2\theta) = 2\varepsilon \operatorname{tg}\theta \quad (8)$$

由于衍射线是在 $2\theta_{hkl} \pm \Delta(2\theta)$ 范围内宽化，因此，由“显微畸变”效应引起的谱线宽化，即“畸变宽化”函数 $N(x)$ 的积分宽度 n_{hkl} 是 $\Delta(2\theta)$ 的两倍，因此，(8) 式可改写成：

$$n_{hkl} = 4\varepsilon \operatorname{tg}\theta \quad (9)$$

这样，式中的 ε 应该是均方根应变值，它标志着材料内点阵“显微畸变”的程度。其中， θ 为 (hkl) 晶面的衍射角， n_{hkl} 单位为弧度。对于各向异性材料来说，畸变分布也具有各向异性，因此，用某一条谱线测得的均方根应变值，只能代表所测晶面法线方向的“显微畸变”程度。

1.3 各种宽化因素之间的关系

实测冷加工试样衍射线形的宽化，是几何宽化和物理宽化因素共同作用的结果。如果用 $h(x)$ 表示实测综合线形的强度分布函数，而 $g(x)$ 和 $f(x)$ 分别是几何宽化函数和物理宽化函数，则三者之间呈下面的卷积关系：

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y) f(x-y) dy \quad (10)$$

公式 (10) 的推导见附录 1。

如果令 B 表示冷加工试样衍射线形的积分宽度（简称综合宽化）， b 表示标准试样衍射线形的积分宽度（简称几何宽化），而物理宽化用 β 表示，则三者之间有如下关系：

$$B = \frac{\beta b}{\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx} \quad (11)$$

此关系式首先是由 Jones, F·W^[4] 导出, 因此称为 Jones 关系式。它的一个重要的理论前提是: 试样经冷加工后, 衍射线形宽化, 而积分面积不变。(11) 式的详细推导过程见附录 2。

在物理宽化因素中, “畸变” 和 “碎化” 两种效应的迭加, 亦遵从卷积关系。仿照公式 (10) 的推导过程也容易得到:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} M(y)N(x-y)dy \quad (12)$$

同样的道理, 如果用 m 表示 “碎化” 宽化, 用 n 表示 “畸变” 宽化, 则 β 、 m 、 n 之间也有同 (11) 式类似的关系:

$$\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} M(x)N(x)dx \quad (13)$$

上述四个关系式是线形分析工作中最基本的关系式。所谓近似函数法, 就是选用适当的已知函数类型, 对实测线形和各种宽化函数进行模拟, 这样根据 $g(x)$, $f(x)$, $M(x)$ 和 $N(x)$ 的具体函数形式, 就可以利用 (11) 和 (13) 两式, 找到 β , B , b 和 β , m , n 之间的具体关系表达式; 根据实测的综合宽化 B 和几何宽化 b , 便可以得到 β , m 和 n , 完成各种宽化效应的分离和计算有关参数。其步骤大致如下:

- (1) $k_{\alpha 1}$ 和 $k_{\alpha 2}$ 双重线的分离, 得到纯 $k_{\alpha 1}$ 线形。
- (2) 选择几何宽化函数和物理宽化函数的近似函数类型。
- (3) 进行几何宽化效应和物理宽化效应的分离, 得到物理宽化 β 。
- (4) 进行 “畸变” 和 “碎化” 两种效应的分离, 分别得到 “畸变” 宽化 n 和 “碎化” 宽化 m 。
- (5) 计算 “显微应变”, “嵌镶碎化” 尺寸并估算位错密度。

下面我们将按以上各个步骤依次进行讨论并重点介绍数据处理的具体方法。最后对近似函数的误差问题加以分析, 以进一步地明确这种方法的优缺点, 最佳适用范围和实际应用时的注意事项。

§2 $K_{\alpha 1}$ 和 $K_{\alpha 2}$ 双重线的分离

由于 $k_{\alpha 1}$ 和 $k_{\alpha 2}$ 两个分量所对应的波长非常接近, 因此, 它们的衍射线形经常重迭在一起, 即使对于较理想的材料和较高角度的衍射线, 这两个分量的衍射线形也要发生部分的重迭。为了消除 $k_{\alpha 2}$ 分量的影响, 得到单一的 $k_{\alpha 1}$ 衍射线形, 需要进行 $k_{\alpha 1}$ 和 $k_{\alpha 2}$ 双重线的分离, 或者叫非单色化校正。下面介绍常用的 Rachinger 图解法和近似函数校正法。

2.1 双重线分离的 Rachinger 图解法^[5]

这种方法有三点假定:

- (1) $k_{\alpha 1}$ 和 $k_{\alpha 2}$ 两个分量的衍射线形相似, 而且底宽相等;
- (2) $k_{\alpha 1}$ 和 $k_{\alpha 2}$ 线形都是对称的, 角距离为 δ 。

$$\delta = \Lambda(2\theta) = 2 \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \operatorname{tg} \theta \quad (14)$$

$\Delta\lambda = \lambda_{a2} - \lambda_{a1}$, λ 为 k_a 线波长, θ 角是对应 k 波长的布拉格角。

(3) k_{a1} 和 k_{a2} 对应点的强度比为 2:1。

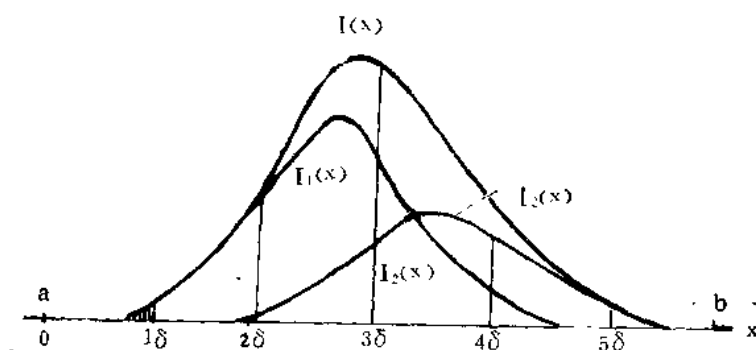


图2 k_{a1} 和 k_{a2} 双重线分离 Rachinger 图解法示意图

事实上这三个条件一般都能很好的满足。假设实测强度分布曲线如图2所示, 图中 a 和 b 两点分别为谱线测量区间的下限角和上限角。Rachinger 图解法的具体步骤是:

(1) 根据实测 k_a 线形的峰值位置 2θ , 利用 (14) 式计算出 k_{a1} 和 k_{a2} 的角分离度 δ (注意单位应转换成度)。

(2) 选择谱线低角限 a 处为相对座标原点, 将横座标分割成为间隔为 δ 的区间。由于在第一个区间内, 即 x 值在 $0 \sim \delta$ 区间内时, 只有 k_{a1} 分量, 所以该区间内 $I_1(x) = I(x)$ 。于是便得到了 $I_1(x)$ 线形的第一段。

(3) 在第二个区间, 即在 $\delta - 2\delta$ 区间, 任意一点 x 处的 $I_1(x)$ 值应该等于总的强度 $I(x)$ 中减去该点的 k_{a2} 分量 $I_2(x)$ 值。根据第二点假定, 在该区间内 x 处

$$I_2(x) = \frac{1}{2} I_1(x - \delta)。所以有:$$

$$I_1(x) = I(x) - \frac{1}{2} I_1(x - \delta)$$

这样, 就可以得到 $\delta - 2\delta$ 区间内任意一点 x 处的 $I_1(x)$ 值, 即得到了这个区间内的 $I_1(x)$ 线形。

(4) 根据同样道理, 便可逐次得到以下各区间内的 $I_1(x)$ 线形, 完成双线分离。显然在最后一个区间, $I_1(x) = 0$, 只存在 k_{a2} 分量。

在实际工作中, 如果只需得到 k_{a1} 分量的积分宽度 B_0 , 那么就不必把 k_{a1} 线形全部分离出来, 只需能准确地得到 k_{a1} 分量的极大值 I_1^0 就可以了。根据 k_a 线形的积分面积 (或 k_a 的积分强度) I 就可以算出 k_{a1} 分量的积分强度 $I_1 = \frac{2}{3} I$, 再除以 I_1^0 就得到了 k_{a1} 分量的积分宽度 B_0 。

应该注意谱线背底的选取，不要由于背底选取偏高而丢掉了谱线的“尾巴”，影响积分强度的真实性。

2.2 近似函数校正法

这种方法是将 $k_{\alpha 1}$ 分量的强度分布近似地用已知函数类型来模拟，所用近似函数类型仍是如下三种：

(1) $e^{-\alpha x^2}$;

(2) $\frac{1}{1+\beta x^2}$;

(3) $\frac{1}{(1+\gamma x^2)^2}$;

根据 Rachinger 图解法原理，实测强度 $I(x) = I_1(x) + \frac{1}{2} I_1(x-\delta)$ 。若实测 k_{α} 线形积分宽度为 B ， $k_{\alpha 1}$ 线形积分宽度为 B_0 ，那么就可以找到分别对应上面三种近似函数类型的 B 、 B_0 和 δ 的关系，并做出如图 3 所示的 $\frac{B_0}{B} \sim \frac{\delta}{B}$ 关系曲线。根据实测的积分宽度 B 和计算出的角分离度 δ ，并利用图 3 中的校正曲线找到对应的 $\frac{B_0}{B}$ 值，便可以得到纯 $k_{\alpha 1}$ 线形的

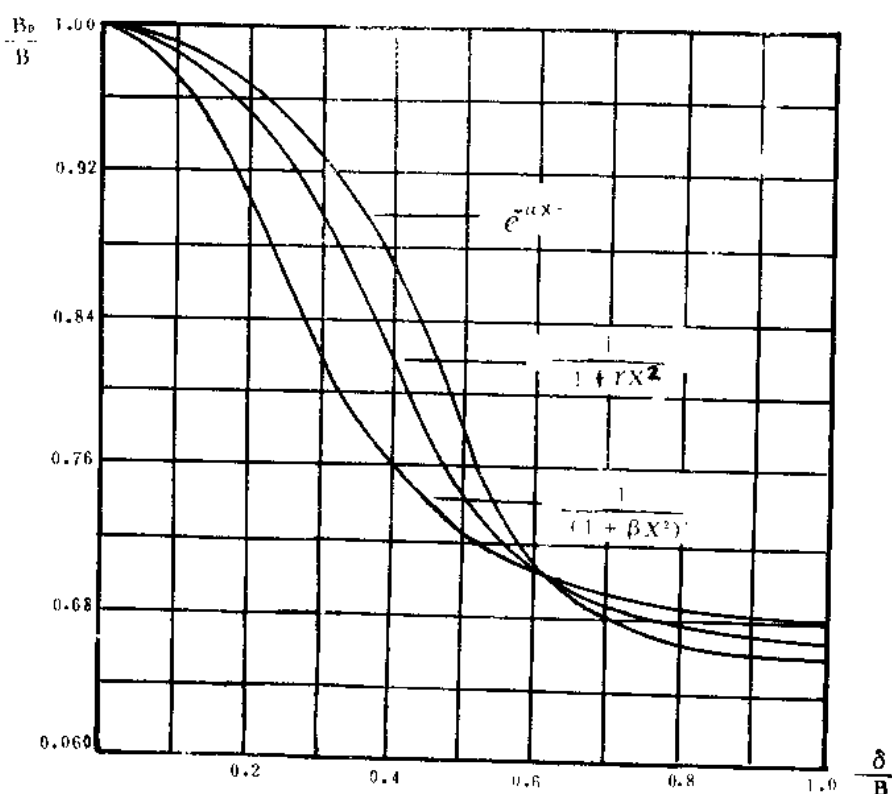


图 3 $K_{\alpha 1}$ 和 $K_{\alpha 2}$ 双重线分离近似函数法校正曲线^[8]

积分宽度 B_0 而完成双线分离的任务。

显然, 必须首先选定 k_{a1} 线形的近似函数类型。以便明确使用图 3 中哪条曲线进行校正。 k_{a1} 线形近似函数类型选择的具体步骤是:

(1) 利用 (14) 式计算出 k_{a1} 和 k_{a2} 双线分离度 δ (单位要与积分宽度一致)。

(2) 分别确定实测谱线 (k_a 线形) 的半高宽 $B_{\frac{1}{2}}$ 和积分宽度 B 。

(3) 计算 $\frac{\delta}{B_{\frac{1}{2}}}$ 值, 利用图 4 中给出的 k_{a1} 线型近似函数类型的判定曲线, 坐标点 $\left(\frac{B_{\frac{1}{2}}}{B}, \frac{\delta}{B_{\frac{1}{2}}}\right)$ 落在 (或接近) 的那条曲线, 它所对应的函数类型即为 k_{a1} 线形的近似函数类型, 从而就明确了用图 3 中的哪条曲线进行非单色化校正, 得到纯 k_{a1} 线形的积分宽度 B_0 。

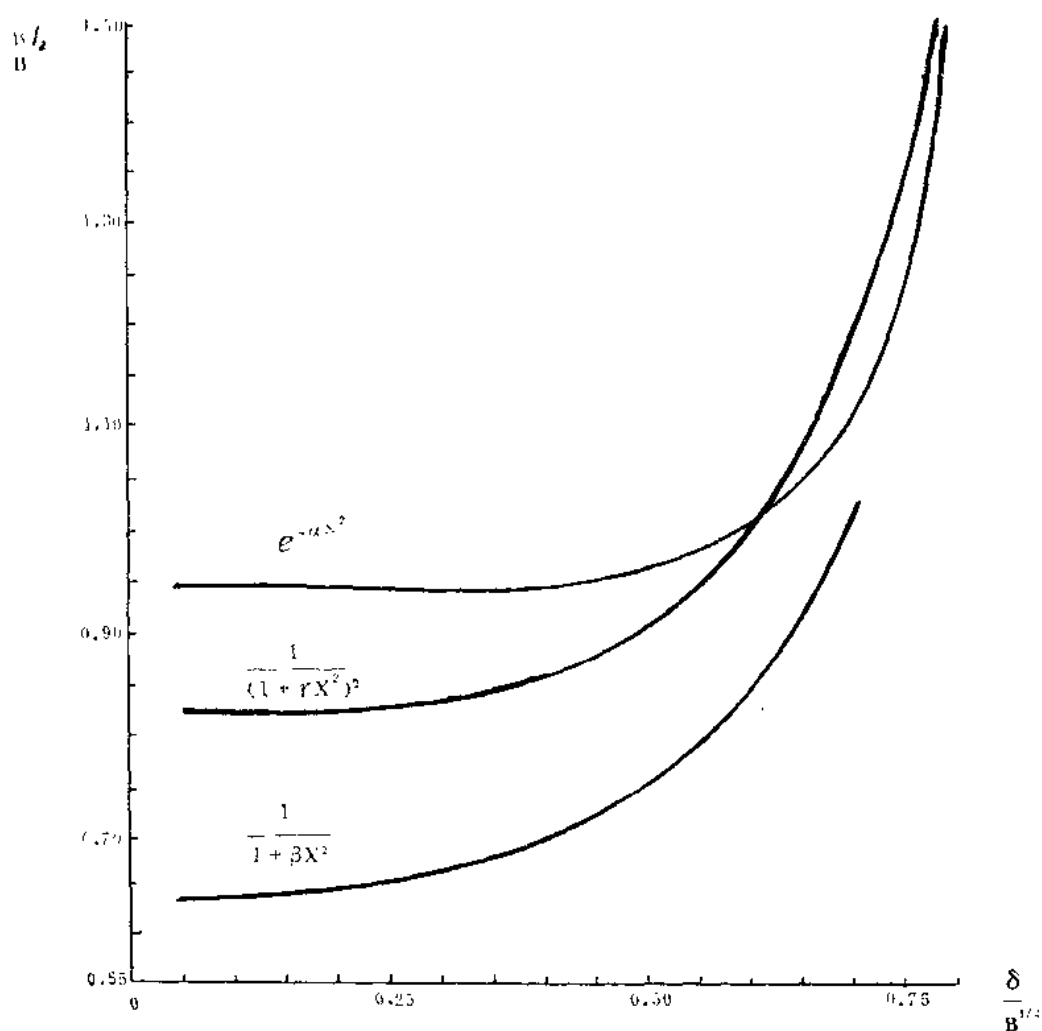


图 4 K_{a1} 线形近似函数类型判定曲线^[20]

§ 3 模拟线形的近似函数类型的选择

如前所述, 为了求解方程 (11), 在完成 $k_{a1} k_{a2}$ 双重分离的基础上, 需要确定几何宽化函数 $g(x)$ 和物理宽化函数 $f(x)$ 的近似函数类型。关于物理宽化函数 $f(x)$ 的近似函数类型, 一般是以冷加工试样线形 $h(x)$ 的近似函数类型来代替, 即认为综合宽化和物理宽化函数类型相近。这种处理, 只有在 $f(x)$ 和 $g(x)$ 函数类型相同 (或相近) 时才是正确的。但是在几何宽化效应比较小时, 这样处理也不会导致较大的误差^[6], 因此也经常被采用。当然, 在处理那些要求比较严格的问题时, $f(x)$ 近似函数类型最好要进行严格判定。下面将介绍近似函数类型选择的几个常规方法和 $f(x)$ 函数类型的直接判定方法。

3.1 尝试法

这是一种比较基本的近似函数类型的选择方法。它是通过对三种函数类型分别进行尝试计算, 而后与实验数据相比较, 看哪一种符合得比较好。具体步骤是:

(1) 确定实测谱线经双线分离后的 k_{a1} 分量的极大值 I_0 和积分宽度 B_0 。

(2) 根据 B_0 值分别计算上述三种钟罩函数所对应的系数。其中, $\alpha = \pi / B_0^2$, $\beta = \pi^2 / B_0^4$, $\gamma = \pi^2 / 4 B_0^2$ 。

(3) 将得到的 α , β , γ 值分别代入对应的函数中, 则三种钟罩函数可分别写成如下形式:

$$I_0 e^{-\frac{\pi}{B_0^2} x^2}, \quad \frac{I_0}{1 + \frac{\pi^2}{B_0^4} x^2}, \quad \frac{I_0}{\left(1 + \frac{\pi^2}{4 B_0^2} x^2\right)^2};$$

(4) 对应不同的 x 值, 分别计算三种函数值, 并且分别与实测强度分布函数 $I_1(x)$ 值相比较, 选择比较接近者做为近似函数。

3.2 直线法

这种方法以及下面将介绍的拟合离散度比较法的出发点都与尝试法相似。所不同的是选用不同的参数来表示拟选函数与测实函数符合的程度。可以设想, 如果被选函数与实测函数完全一致, 那么对应所有 x 值, 这两个函数值之比都是 1。也就是说, 将这两个函数的比值做为纵座标, x 为横座标, 那么所有点都应落在一条直线上。如果两个函数不相符合, 座标点就会偏离直线, 符合得越不好, 偏离越大。反之, 座标点愈接近直线, 就说明这两个函数愈接近。因此, 用实测函数与被选函数之比做为新的函数, 将角度座标 x 做为自变量, 进行直线回归处理, 计算线性回归系数, 以 γ 大者为佳。具体步骤是:

(1) 求出实测强度分布曲线经过双线分离后的纯 k_{a1} 线形的极大值 I_0 和积分宽度 B_0 ;

(2) 根据积分宽度 B_0 , 分别计算三种分布函数的系数 (方法前而已经介绍了)。

(3) 对下面三个函数分别进行直线回归处理, 计算各自的线性回归系数。

$$\frac{I_1(x)}{I_0} e^{-\frac{\pi}{B_0^2} x^2} \sim x,$$

$$\frac{I_1(x)}{I_0} \left(1 + \frac{\pi^2}{B_0^2} x^2 \right) \sim x,$$

$$\frac{I_1(x)}{I_0} \left(1 + \frac{\pi^2}{4B_0^2} x^2 \right)^2 \sim x;$$

(4) 比较上面三种近似函数对应的线性回归系数 γ , 最大者所对应的函数, 就被选定为近似函数类型。

3.3 拟合离散度 S_j^2 判别法

这种方法与直线法基本相同, 它是采用拟合离散度 S_j^2 来比较实测函数与拟选函数的符合程度。以 S_j^2 最小者为佳。具体方法是:

- (1) 求出实测强度分布曲线经双线分离后的纯 k_{a1} 线形的极大值 I_0 和积分宽度 B_0 ;
- (2) 分别按下式计算三种函数对应的拟合离散度 S_j^2 ;

$$S_j^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [I_1(x_i) - I_0 f_i(x_i)]^2 \quad (15)$$

其中, $j = 1, 2, 3$, 分别对应三种分布函数;

n 为比较的数据点数目, $f_i(x)$ 分别为

$$f_1(x) = e^{-\frac{\pi}{B_0^2} x^2},$$

$$f_2(x) = \frac{1}{1 + \frac{\pi^2}{B_0^2} x^2},$$

$$f_3(x) = \left(\frac{1}{1 + \frac{\pi^2}{4B_0^2} x^2} \right)^2;$$

(3) 比较 S_j^2 的大小, 最小的 S_j^2 所对应的函数即为选定的近似函数类型。

上述三种方法中, 以后面两种较为实用, 方法简便, 借助一般的小型计算器就可以完成。但是, 在使用时要注意所测数据中个别奇异点的影响。同时, 自变量 x 的取值要注意下面几个问题: (1) 令强度极大值所对应的座标 $x_0 = 0$; (2) 离开极大值处第 N 个测量点的座标 $x_i = i\Delta(2\theta)$, 其中 $i = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$, $\Delta(2\theta)$ 为步长。

3.4 积半比判别法⁽²⁰⁾

钟罩分布函数的积半比 (ε 表示), 是区别分布函数类型的特征量。它的定义是: 函数分布的半高宽 $B_0^{\frac{1}{2}}$ 和积分宽度 B_0 之比, 即 $\varepsilon = B_0^{\frac{1}{2}}/B_0$ 。可以证明, 积半比与分布函数的待定

系数无关。下面分别讨论三种钟罩函数所对应的积半比表达式。

(1) 高斯分布函数 $I = I_0 e^{-\alpha x^2}$

根据积分宽度的定义可知:

$$B_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

由于钟罩分布函数具有对称性, 那么令 $x_{\frac{1}{2}}$ 为强度是 $\frac{1}{2}$ 极大值处的座标, 则有

$$\frac{1}{2} I_0 = I_0 e^{-\alpha x_{\frac{1}{2}}^2},$$

于是可以解得:

$$x_{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\alpha}},$$

半高宽为:

$$B_0^{\frac{1}{2}} = 2x_{\frac{1}{2}} = 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\alpha}}$$

积半比为:

$$\varepsilon = \frac{B_0^{\frac{1}{2}}}{B_0} = 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \approx 0.939$$

(2) 柯西分布函数 $I = I_0 (1 + \alpha x^2)^{-1}$

同样道理, 积分宽度 $B_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + \alpha x^2)^{-1} dx = \frac{\pi}{\sqrt{\alpha}}$, 强度为极大值一半时

$\frac{1}{2} I_0 = I_0 (1 + \alpha x_{\frac{1}{2}}^2)^{-1}$, 可以解得 $x_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$, 半高宽为:

$$B_0^{\frac{1}{2}} = \frac{2}{\sqrt{\alpha}}$$

积半比为:

$$\varepsilon = \frac{B_0^{\frac{1}{2}}}{B_0} = \frac{2}{\pi} \approx 0.636$$

(3) 分布函数为 $I = I_0 (1 + \alpha x^2)^{-2}$ 时积分宽度为:

$$B_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + \alpha x^2)^{-2} dx = \frac{\pi}{2\sqrt{\alpha}}$$

当强度等于极大值一半时有:

$$\frac{1}{2} I_0 = I_0 (1 + \alpha x_{\frac{1}{2}}^2)^{-2},$$

可以解得: $x_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}}$ 半高宽为:

$$B_0^{\frac{1}{2}} = 2x_{\frac{1}{2}} = 2 \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}},$$

积半比为:

$$\epsilon = \frac{4}{\pi} \sqrt{\sqrt{2}-1} \approx 0.819$$

把上面三种分布函数所对应的积半比表达式和其近似值列于表 2 中。

表 2 三种分布函数对应的积半比

分布函数	$I = I_0 e^{-\alpha x^2}$	$I = I_0 (1 + \alpha x^2)^{-1}$	$I = I_0 (1 + \alpha x^2)^{-2}$
积半比表达式	$2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}$	$\frac{2}{\pi}$	$\frac{4}{\pi} \sqrt{\sqrt{2}-1}$
积半比近似值	0.939	0.636	0.819

可以看出, 三种分布函数的积半比只与函数类型有关, 而与待定系数 α 无关。因此, 积半比可以做为选择近似函数类型的判据。如果实测强度分布函数 (指 k_{a1} 线型) 接近这三种典型的钟罩函数中的某一种, 那么它的积半比也一定最接近这种分布函数的积半比。因此, 在实际判定时只要找到实测函数纯 k_{a1} 线型的半高宽和积分宽度, 并计算出相应的积半比, 利用表 2 即可找到较为合适的近似函数类型。应该指出, 在实际工作中, 可能出现从实测函数所得积半比介于表中给出的三个近似函数某两个数值之间, 而无法选择的情况。此时最好还采用 S_1^2 法严格加以区别。

关于 k_{a1} 线型的半高宽的计算, 仍然可以利用两种方法, 即 Rachinger 图解法和近似函数校正法。如果在做 k_{a1} 和 k_{a2} 双重线分离这一步时是采用 Rachinger 图解法, 那么可以同时能够得到积分宽度 B_0 和半高宽 $B_0^{\frac{1}{2}}$; 如果采用的是近似函数校正法, 那么, 在利用图 4 判定了 k_{a1} 线形的近似函数类型之后, 借助图 3 得到纯 k_{a1} 线形的积分宽度 B_0 , 再利用图 5 中对应这种函数类型的 $\frac{B_0^{\frac{1}{2}}}{B_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}} \sim \frac{\delta}{B_{\frac{1}{2}}}$ 校正曲线, 可直接得到半高宽 $B_0^{\frac{1}{2}}$ 。实践证明, 利用近

似函数校正法所得到的 k_{a1} 分量的积分宽度 B_0 和半高宽 $B_0^{\frac{1}{2}}$ 与利用 Rachinger 图解法所得到的结果基本上是相同的。

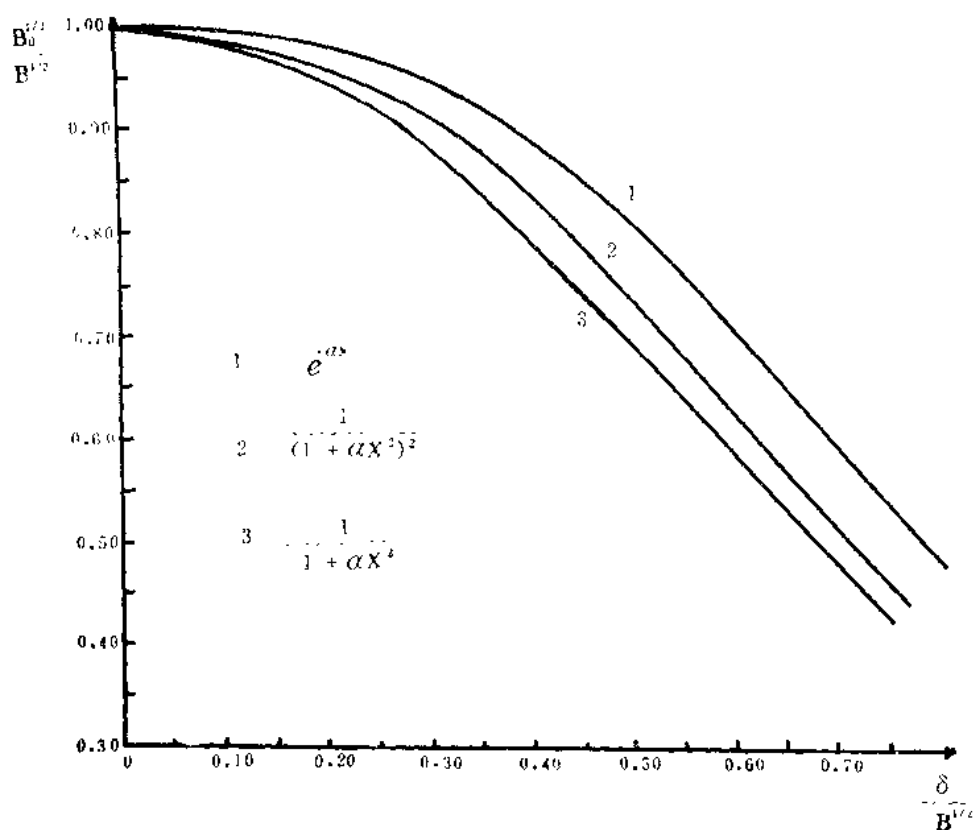


图5 $K_{\alpha 1}$ 线形半高宽校正曲线^[20]

3.5 物理宽化函数 $f(x)$ 的函数类型的判定

我们知道, 综合宽化函数 $h(x)$ 和几何宽化函数 $g(x)$ 的近似函数类型, 可以根据实测数据采用上述方法加以判断。而物理宽化函数 $f(x)$ 的近似函数类型却难以利用实验数据进行判定。因此, 往往采取人为的假定或直接用综合宽化函数 $h(x)$ 的近似函数类型加以代替。这样处理不免带有人为性和任意性, 这也是近似函数法须待解决的问题之一。为了解决这个问题, 文献^[20]根据利用积半比判定近似函数类型的道理, 用于判定 $f(x)$ 的近似函数类型。

不难看出, 卷积合成公式 $h(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)f(y-x)dx$ 中, 如果令 $g(x)$ 和 $f(x)$ 分别取三种钟罩函数, 那么, 将组成各种组合。当给定了 $g(x)$ 和 $f(x)$ 的具体函数形式后, 对于一定的 y 值上面的积分就变成了在无穷区间内的数值积分, 而这种积分可以利用电子计算机在有限区间内近似求解。也就是能计算出对应各种组合的卷积合成函数 $h(y)$ 和对应的积半比 ε_h 。由此可见, $h(y)$ 函数的积半比 ε_h 与对应的原函数 $g(x)$ 和 $f(x)$ 的积半比 ε_g 和 ε_f 对于不同的组合有着不同的对应关系, 因此, 它可以做为判定原函数 $f(x)$ 函数类型的根据。表3中列出了这些对应关系。