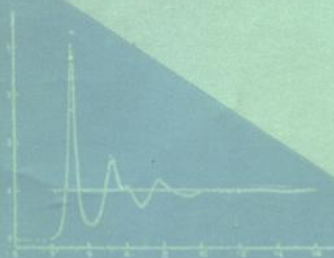
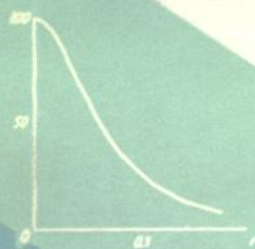
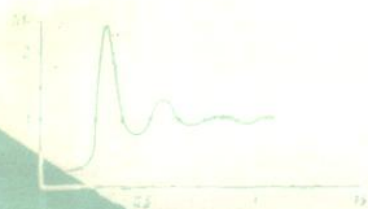


非晶体及晶体缺陷的 X 射线衍射

王煜明 编著



科学出版社

非晶体及晶体缺陷的 X射线衍射

王煜明 编著

科学出版社

1988

内 容 简 介

本书系统介绍非晶体及晶体缺陷的X射线衍射基本理论,概括叙述相应的实验方法。全书共分四章。第一章介绍X射线衍射的一般理论,适用于所有晶体和非晶体材料。第二章为非晶体的X射线衍射基本理论及一些实验方法,包括气体、液体及非晶固体;对多组元非晶态合金作了较详细的处理。第三章是微小晶体的衍射效应,从理论和实验上作了全面介绍。第四章叙述晶体中存在缺陷时产生的X射线衍射效应,对位错和堆垛层错的效应作了较详细的描述,对最近的成果及发展动向也作了概括性介绍。

本书可作为固体物理或固体化学类研究生的教学参考书,也可供相应专业的科技工作者参考。

非晶体及晶体缺陷的 X射线衍射

王煜明 编著
责任编辑 方开文

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1988年3月第一版 开本:787×1092 1/32

1988年3月第一次印刷 印张:6 3/4

印数:0001—4,850 字数:151,000

ISBN 7-03-000242-3/O·68

定价: 1.80 元

前 言

本书是根据作者历年在吉林大学物理系给研究生讲课的材料改写而成的。改写过程中主要补充了非晶固体 X 射线衍射理论、实验和分析方法以及位错群的 X 射线衍射效应。这两部分内容都是近年来发展最快、成果最多的。许多前沿工作都集中在这两个领域中,某些理论和研究成果虽不太成熟,但很有参考价值。

X 射线衍射理论对晶体而言,已经发展得相当完备。近年来由于非晶合金急冷条带工艺的发明和发展以及高分子材料等无定形材料的发展,非晶体的衍射问题已具有重要的理论和实际意义,因而越来越受到人们的重视。另一方面,在实际晶体中存在大量的晶体缺陷。点缺陷和面缺陷对 X 射线衍射的影响不大;线缺陷主要是位错及与其相关的堆垛层错,有较大影响而不可忽视。本书在以上各个领域均提供了系统的理论及实验资料,读者掌握了这些资料就可以深入进行若干专题研究。

中子散射和电子衍射在固体材料研究方面的应用近年来发展很快,它们所依据的基本理论是与 X 射线衍射大同小异的。从事这方面工作必须首先掌握 X 射线衍射理论。本书对中子散射及电子衍射的特殊点也作了简要的说明。至于在电子衍射问题中颇为重要的动力学效应,由于篇幅所限,本书没有介绍,请读者参阅其他专门资料。

我们假定读者在阅读本书之前,已经掌握了固体物理及 X 射线晶体学的基本知识,具有大学物理专业、化学专业或材

料科学专业水平。否则就需要学习一些预备知识。本书基本理论部分力求安排得有系统,循序渐进,读者不必阅读很多文献就可以全面理解。而实验技术及最新成果方面是高度概括的,读者可根据自己的兴趣及需要参阅所引文献。由于作者水平所限,在内容及安排方面必然还有很多错误及缺点,希望读者指正。

本书在编写过程中得到吉林大学物理系金属物理教研室许多教师及研究生的帮助,他们提出了许多宝贵意见,特别是余瑞璜教授,曾给了很大的帮助和指导。初稿写成后,又经上海冶金研究所许顺生研究员审阅。在此谨表示衷心的感谢。

王煜明

1986年7月于长春

目 录

第一章 X射线衍射的一般理论	1
§ 1.1 衍射振幅公式	1
§ 1.2 衍射强度公式	3
§ 1.3 $I_N(s)$ 的平均值	6
§ 1.4 均匀物体的衍射	8
§ 1.5 各向同性的特殊情况	18
§ 1.6 粉末照相的德拜公式	21
§ 1.7 非等同粒子集团的衍射	24
第二章 非晶物质的X射线衍射	26
§ 2.1 理想气体的衍射	26
§ 2.2 实际气体、液体及非晶固体	32
§ 2.3 多组元非晶态合金的衍射理论	42
§ 2.4 非晶固体的结构	55
§ 2.5 实验技术问题	65
第三章 微小晶体的衍射	69
§ 3.1 基本理论	69
§ 3.2 微小晶体的衍射强度	72
§ 3.3 晶体粉末的衍射	76
§ 3.4 晶体纤维的衍射	85
§ 3.5 线宽和线形的实验测量	86
第四章 不完整晶体的衍射	91
§ 4.1 第一类和第二类的晶体不完整性	91
§ 4.2 不完整晶体衍射的一般公式	92

§ 4.3	晶体中原子热运动对X射线衍射的影响·····	106
§ 4.4	位移无序·····	120
§ 4.5	形变金属结构·····	142
§ 4.6	晶体中位错的X射线衍射·····	149
§ 4.7	置换无序·····	171
§ 4.8	位移无序和置换无序同时存在·····	178
§ 4.9	破坏远程序的晶体缺陷·····	187
参考文献·····		205

第一章 X 射线衍射的一般理论

X 射线照射到物体上,受到物体中原子的散射,每个原子都产生散射波,这些波的互相干涉,结果就产生衍射。衍射强度通常是随观察方向改变的,其变化与物体的原子结构有关。我们的任务就是要找出这种关系的规律性。对于晶体,这种规律就是布喇格定律。

§ 1.1 衍射振幅公式

一个物体,由 N 个原子组成,它们的位置矢量是 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ (取任意点为原点),它们的散射因子是 $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots, f_N$ 。第 n 个原子的散射因子为 f_n 。一个孤立电子的 f 散射振幅取为 1,假定物体足够小, X 射线吸收可忽略,即射到每个原子的 X 射线具有相同的振幅。用 $\mathbf{S}_i$ 及 $\mathbf{S}_0$ 代表入射方向和观察方向的单位矢量,则 N 个元波叠加结果所得衍射波的振幅为

$$A = \sum_1^N f_n \exp\left(-2\pi i \frac{\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_0}{\lambda} \cdot \mathbf{x}_n\right). \quad (1.1)$$

在衍射理论中经常用倒易空间概念,在晶体情况就是倒易晶格。倒易空间中每一点,代表一个观察方向,它的位置矢量是

$$\mathbf{s} = (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_0)/\lambda,$$

如图 1.1 所示,故有 $|\mathbf{s}| = s = 2 \sin \theta / \lambda$. (1.2)

因此 (1.1) 式变为

的X射线结构振幅。由此得到全部晶体X射线衍射理论。

§ 1.2 衍射强度公式

在实际测量中,衍射波的相位是无法测量的,能测的只有强度,即振幅的模平方 $A \cdot A^*$ 。经常用到的一个概念是“散射本领” $I_N(\mathbf{s})$,它是 N 个原子组成的物体的衍射强度与一个孤立电子散射强度之比,或称为以电子单位表示的衍射强度。而用 $I(\mathbf{s}) = I_N(\mathbf{s})/N$ 表示平均到每个原子的衍射本领。在普遍情况下, N 个原子可推广为 N 个相同的集团(分子,晶胞等),如 $F(\mathbf{s})$ 是每个集团的结构因子,则

$$\mathcal{F}(\mathbf{s}) = I(\mathbf{s})/F^2 = I_N(\mathbf{s})/NF^2,$$

$\mathcal{F}(\mathbf{s})$ 称为干涉函数。如各个集团的散射波互不相干,则 $\mathcal{F}(\mathbf{s})$ 为 1,除此之外,其他所有值都意味着互相干涉。我们的任务就是找到各种衍射情况下的 $I(\mathbf{s})$ 与 $\mathbf{s}$ 的关系,乘上 N ,得 $I_N(\mathbf{s})$,乘上吸收因子,再乘上在此条件下每个孤立电子的散射强度,即可得到实验应测得的衍射强度。而

$$I_N(\mathbf{s}) = A(\mathbf{s}) \cdot A^*(\mathbf{s}) \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_1^N f_n \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_n) \\ &\quad \cdot \sum_1^N f_{n'} \exp(+2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_{n'}) \\ &= \sum_1^N \sum_1^N f_n f_{n'} \exp[-2\pi i \mathbf{s} \\ &\quad \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n'})]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

因为一般情况下 f_n 是实数,现在把 $n = n'$ 的项提出来,共有 N 项,归并为 $\sum f_n^2$; $n \neq n'$ 的共有 $N(N-1)$ 项,而且与 n ,

n' 对应的两项是共轭复数, 它们之和为

$$f_n f_{n'} \{ \cos[2\pi \mathbf{s} \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n'})] + \cos[2\pi \mathbf{s} \cdot (\mathbf{x}_{n'} - \mathbf{x}_n)] \}, \quad (1.8)$$

用 $\mathbf{x}_{nn'}$ 表示连结 n, n' 原子的矢量, 则

$$I_N(\mathbf{s}) = \sum_1^N f_n^2 + \sum_{n \neq n'} \sum f_n f_{n'} \cos(2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_{nn'}). \quad (1.9)$$

如果所有原子都等同, 或所有集团 (分子、晶胞等) 都是等同的, 则都有同一个 F 值, 由 (1.9) 式可以得到

$$\begin{aligned} I(\mathbf{s}) &= I_N(\mathbf{s})/N \\ &= F^2 + \frac{F^2}{N} \sum_{n \neq n'} \sum \cos(2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_{nn'}), \\ \mathcal{I}(\mathbf{s}) &= I_N(\mathbf{s})/NF^2 \\ &= 1 + \frac{1}{N} \sum_{n \neq n'} \sum \cos(2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_{nn'}). \end{aligned} \quad (1.10)$$

如把 (1.9) 式用到最简单的晶体情况, 每个格点上有一个原子, 原子散射因子为 f , 晶格中两格点间连结矢量为 $\mathbf{x}_{nn'}$, 则

$$\mathbf{x}_{nn'} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}, \quad u, v, w \text{ 为整数.}$$

满足反射条件时, $\mathbf{s} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$,

故 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{x}_{nn'} = uh + vk + wl$ 还是整数, 则

$$I_N(h, k, l) = Nf^2 + N(N-1)f^2 = N^2f^2.$$

这就是各个衍射线的强度, 其中 f 是 h, k, l 的函数.

现在用电子密度来表示强度, 以下我们把符号 $\mathbf{x}$ 换成符号 $\mathbf{u}$,

$$\begin{aligned} I_N(\mathbf{s}) &= A^*(\mathbf{s}) \cdot A(\mathbf{s}) = \int \rho(\mathbf{u}) \exp(2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{v}_u \\ &\quad \cdot \int \rho(\mathbf{u}') \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}') d\mathbf{v}_{u'} \\ &= \iint \rho(\mathbf{u}) \rho(\mathbf{u}') \exp[-2\pi i \mathbf{s} \cdot (\mathbf{u}' - \mathbf{u})] d\mathbf{v}_u d\mathbf{v}_{u'}. \end{aligned}$$

令 $\mathbf{x} = \mathbf{u}' - \mathbf{u}$, 得

$$\begin{aligned} I_N(\mathbf{s}) &= \iint \rho(\mathbf{u})\rho(\mathbf{x} + \mathbf{u}) \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{v}_x d\mathbf{v}_u \\ &= \int \mathcal{L}(\mathbf{x}) \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{v}_x, \end{aligned} \quad (1.11)$$

其中
$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \int \rho(\mathbf{u})\rho(\mathbf{x} + \mathbf{u}) d\mathbf{v}_u. \quad (1.12)$$

如物体由 N 个等同集团或 N 个等同原子组成, 最好用另一形式的公式. 引入集团的结构振幅 F 和局部原子密度 ρ_a 来代替电子密度 ρ , 得

$$A(\mathbf{s}) = F(\mathbf{s}) \int \rho_a(\mathbf{u}) \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{v}_u.$$

令 V 表示物体体积, v_1 表示每个集团占有的平均体积, 则 $N = V/v_1$, 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{s}) &= I_N(\mathbf{s})/N|F|^2 \\ &= v_1 \int \frac{\mathcal{L}_a(\mathbf{x})}{V} \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{v}_x, \end{aligned} \quad (1.13)$$

其中
$$\mathcal{L}_a(\mathbf{x}) = \int \rho_a(\mathbf{u}) \cdot \rho_a(\mathbf{u} + \mathbf{x}) d\mathbf{v}_u. \quad (1.14)$$

(1.12) 式中 $\mathcal{L}(\mathbf{x})$ 称为推广的帕特孙函数. (1.11) 式表示 $I_N(\mathbf{s})$ 是 $\mathcal{L}(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换. 因此

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \int I_N(\mathbf{s}) \exp(2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{v}_s. \quad (1.15)$$

原则上 $I_N(\mathbf{s})$ 在整个倒易空间中可测定, 由此可得 $\mathcal{L}(\mathbf{x})$. 但 $\mathcal{L}(\mathbf{x})/V$ 实际上是两点 (相距 $\mathbf{x}$) 电子密度乘积的平均值, $\mathcal{L}_a(\mathbf{x})/V$ 则是两点原子密度乘积的平均值. 可见由 $I_N(\mathbf{s})$ 决定的的是一个很复杂的物质分布函数, 并不是真正的结构. 这是因为我们不能测出衍射波的相位, 因而不能测定衍射振幅, 而只能测出衍射强度, 这是 X 射线结构分析的根本困难.

(1.11) 式很重要, 以下各种具体情况都由这普遍公式出发来解决。不用简单的 (1.6) 式, 而用复杂的 (1.11) 式, 好像很奇怪, 这是因为在许多情况下只有 (1.11) 式实际可用。物体中的分子和原子都在不停地运动, 只有用统计分布才有意义。当然它们的运动相对于 X 射线电磁振动来说是很慢的, 但对我们作一次测量的时间来说却是很快的, 即我们测得的是统计平均结果。利用 (1.11) 式, 可把平均强度和物质统计分布联系起来。用 (1.3) 式只能得到平均振幅, 而平均振幅和平均强度是不能直接联系的。例如, 如果全部原子集体运动, 但相对位置不变, 则平均振幅为零, 而平均强度却不变, 因为由 (1.7) 式, 强度只和 $\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n'}$ 有关。如振幅的模量很容易计算, 则振幅公式可用, 特别是振幅为零时平均强度当然也为零。

§ 1.3 $I_N(\mathbf{s})$ 的平均值

令 $\mathcal{N}$ 代表 N 个原子中总的电子数,

$$\mathcal{N} = \sum_1^N f_n(0), f_n(0) \text{ 是 } \mathbf{s} = 0 \text{ 时第 } n \text{ 个原子的}$$

散射因子。用 $\mathbf{y}_{pp'}$ 表示 p 和 p' 电子间的距离矢量。(1.7) 式中如果不把原子看作基本散射单元, 而把电子看作散射单元, 则由于电子散射因子是 1, (1.9) 式成为

$$I_N(\mathbf{s}) = \mathcal{N} + \sum_{p \neq p'} \sum \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{y}_{pp'}). \quad (1.16)$$

第一项与 $\mathbf{s}$ 无关, 其他项围绕零振动。如在整个倒易空间取 $I_N(\mathbf{s})$ 的平均值, 则这些项的平均值为零, $I_N(\mathbf{s})$ 平均值应为 $\mathcal{N}$ 。下面严格证明这一点。

$$\int I_N(\mathbf{s}) d\mathbf{v}_s = \int \mathcal{N} d\mathbf{v}_s \\ + \sum_{p \neq p'} \sum \int \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{y}_{pp'}) d\mathbf{v}_s.$$

设倒易空间中 $\mathbf{s}$ 的分量为 $s_i (i=1, 2, 3)$, 正空间中 $\mathbf{y}_{pp'}$ 的分量为 $(y_{pp'})_i (i=1, 2, 3)$, 积分区取倒易空间中一个长方体

$-L_i < s_i < L_i$, 则每个积分

$$\int \exp \left\{ -2\pi i \left[\sum_i s_i (y_{pp'})_i \right] \right\} d\mathbf{v}_s \\ = \int_{-L_1}^{+L_1} \exp[-2\pi i s_1 (y_{pp'})_1] ds_1 \\ \cdot \int_{-L_2}^{+L_2} \exp[-2\pi i s_2 (y_{pp'})_2] ds_2 \\ \cdot \int_{-L_3}^{+L_3} \exp[-2\pi i s_3 (y_{pp'})_3] ds_3.$$

因为

$$\int_{-L_i}^{+L_i} \exp[-2\pi i s_i (y_{pp'})_i] ds_i \\ = 2L_i \frac{\sin[2\pi L_i (y_{pp'})_i]}{2\pi L_i (y_{pp'})_i}, \quad (1.17)$$

所以 $I_N(\mathbf{s})$ 在 $V = 8L_1L_2L_3$ 中的平均值为

$$\frac{\int I_N(\mathbf{s}) d\mathbf{v}_s}{V} = \overline{I_N(\mathbf{s})} = \mathcal{N} + \frac{\sin[2\pi L_1 (y_{pp'})_1]}{2\pi L_1 (y_{pp'})_1} \\ \cdot \frac{\sin[2\pi L_2 (y_{pp'})_2]}{2\pi L_2 (y_{pp'})_2} \cdot \frac{\sin[2\pi L_3 (y_{pp'})_3]}{2\pi L_3 (y_{pp'})_3}.$$

$$L_1, L_2, L_3 \rightarrow \infty \text{ 时 } \frac{\sin Q}{Q} = 0, \quad Q = 2\pi L_i (y_{pp'})_i,$$

$$\therefore \overline{I_N(\mathbf{s})} \rightarrow \mathcal{N}. \quad (1.18)$$

证明完毕.

$$\overline{I(\mathbf{s})} = \overline{I_N(\mathbf{s})}/N = \mathcal{N}/N,$$

如每个散射集团是一个原子, 原子序数为 Z , 则 $\mathcal{N} = NZ$, $\overline{I(\mathbf{s})} = Z$.

由 (1.10) 式, 干涉函数的平均值为 1. 可见干涉只引起衍射强度在倒易空间作一定分布, 不影响平均强度. 平均强度与原子排列方式无关, 它与同样数量原子互相孤立地散射时的总强度相同. 这就是能量守恒.

§ 1.4 均匀物体的衍射

大多数物体都是由大量原子和分子组成的, 某一瞬时这些分子和原子的准确位置无法确定, 只能根据宏观状态确定其统计分布. 例如气体分子根据温度、压力确定统计分布. 由衍射效应也得不到瞬时原子的确定分布, 只能得到某个统计分布的平均效应. 因为 $I_N(\mathbf{s})$ 是 $\mathcal{L}(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换, 所以 $\overline{I_N(\mathbf{s})}$ 是 $\overline{\mathcal{L}(\mathbf{x})}$ 的傅里叶变换.

现在来研究 $\mathcal{L}(\mathbf{x})$.

1.4.1 均匀无限物体的 $\overline{\mathcal{L}(\mathbf{x})}$

如果物体是有限的, 则表面原子状态和内部不同 (有表面张力等). 如果忽略这些表面效应, 把有限物体看作是无限物体中切出来的, 则可把有限物体中电子分布写成

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_\infty(\mathbf{x}) \cdot \sigma(\mathbf{x}), \quad (1.19)$$

其中 $\rho_\infty(\mathbf{x})$ 是无限物体中的电子密度, $\sigma(\mathbf{x})$ 为物体形状因子, 在有限物体内部它等于 1, 在有限物体外它等于 0.

先计算无限物体情况. 假定物体由同一种原子组成 (同一种集团也可以), 取足够大的体积 V , 所包含的原子数为 N , 则每个原子占有空间体积 $v_1 = V/N$. 取某一原子中心为原

点, 则 $\mathbf{x}$ 处 $d\nu$ 小体积内的原子数为 $dp(\mathbf{x})$. 当原子排列完全任意时, 任一 $d\nu$ 中原子数均为 $d\nu/v_1$; 当原子统计分布有一定规律时,

$$dp(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}) \frac{d\nu}{v_1}. \quad (1.20)$$

$p(\mathbf{x})$ 一般称作分布函数, 它决定原子的统计分布。

在完全有序的物体(晶体)中, 除晶格格点以外各处 $p(\mathbf{x})$ 均为零。

在无序情况, 如把原子看作半径 r 的球, 则 $|\mathbf{x}| < 2r$ 时 $p(\mathbf{x}) = 0$, 在远处每个原子的影响消失, 即 $|\mathbf{x}| \gg r$ 时 $p(\mathbf{x}) = 1$. 可见在 $\mathbf{x}$ 较小的范围内 $p(\mathbf{x})$ 才偏离 1, 这反映出一种近程序, 这种近程序普遍存在于气、液和非晶固体中。

由于我们取某一原子中心为原点, $\mathbf{x} = 0$ 处必有原子, 原子统计分布函数可写为

$$z(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) + \frac{1}{v_1} p(\mathbf{x}), \quad (1.21)$$

其中 $\delta(\mathbf{x})$ 是 δ 函数。例如在简单晶格(每个格点一个原子)情况可写成

$$z(\mathbf{x}) = \sum_m \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_m),$$

$\mathbf{x}_m$ 是任一晶格矢量。 $p(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}$ 较小时偏离 1, 故用 $p(\mathbf{x}) - 1$ 较方便, 把 (1.21) 式改为

$$z(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) + \frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_1} [p(\mathbf{x}) - 1]. \quad (1.22)$$

$z(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换用 $Z(\mathbf{s})$ 表示, $\delta(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换为 1, $1/v_1$ 的傅里叶变换为 $\delta(\mathbf{s})/v_1$, 所以

$$Z(\mathbf{s}) = 1 + \frac{1}{v_1} \delta(\mathbf{s}) +$$

$$+ \frac{1}{v_1} \text{ 傅里叶变换 } [p(\mathbf{x}) - 1]. \quad (1.23)$$

现在来求 $\overline{\mathcal{L}_a(\mathbf{x})}/V$, 利用 (1.13) 式, 把它和 $z(\mathbf{x})$ 相连. 对均匀无限物质, $\overline{\mathcal{L}_a(\mathbf{x})}/V$ 与 (1.14) 式中积分所取体积无关. 令 $p_a(\mathbf{x}) = \overline{\mathcal{L}_a(\mathbf{x})}/V$, 则积分 (1.14) 式可在任何一个单位体积上进行, 然后取统计平均值. 把此单位体积分成许多 $d\nu_u$, 如其中无原子, 对积分无贡献. 如有原子, 则 $\rho_a(\mathbf{u})d\nu_u = 1$. 每单位体积应包含 $1/v_1$ 个原子, 所以积分应为 $1/v_1$ 项 $\rho_a(\mathbf{u} + \mathbf{x})$ 之和. 而 $\rho_a(\mathbf{u} + \mathbf{x})$ 的统计平均值即为 $z(\mathbf{x})$, 故得

$$p_a(\mathbf{x}) = \overline{\mathcal{L}_a(\mathbf{x})}/V = z(\mathbf{x})/v_1. \quad (1.24)$$

1.4.2 均匀有限物体

对于有限物体必须引入形状因子 $\sigma(\mathbf{x})$. 先研究衍射振幅, 它是 $\rho(\mathbf{x}) = \rho_\infty(\mathbf{x}) \cdot \sigma(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换. 先讨论傅里叶变换的一个基本性质. 两个函数 $f(\mathbf{x})$ 及 $g(\mathbf{x})$, 其傅里叶变换为 $F(\mathbf{s})$ 和 $G(\mathbf{s})$, 如 $Y(\mathbf{s})$ 是 $y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换, 则 $Y(\mathbf{s})$ 是 $F(\mathbf{s})$ 和 $G(\mathbf{s})$ 的卷积, 即

$$Y(\mathbf{s}) = F(\mathbf{s}) * G(\mathbf{s}) = \int F(\mathbf{u})G(\mathbf{s} - \mathbf{u})d\nu_u. \quad (1.25)$$

反过来, 如 $y(\mathbf{x})$ 是 $f(\mathbf{x})$ 及 $g(\mathbf{x})$ 的卷积, 即

$$y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) * g(\mathbf{x}) = \int f(\mathbf{u})g(\mathbf{x} - \mathbf{u})d\nu_u, \quad (1.26)$$

则

$$Y(\mathbf{s}) = F(\mathbf{s}) \cdot G(\mathbf{s}).$$

由 (1.4) 式,

$$A(\mathbf{s}) = \int \rho_\infty(\mathbf{x}) \cdot \sigma(\mathbf{x}) \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\nu_x,$$

如

$$\Sigma(\mathbf{s}) = \int \sigma(\mathbf{x}) \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d\nu_x, \quad (1.27)$$

则