

● 吉林大学学术丛书 ●

余瑞璜 科学论文选集



吉林大学出版社

余瑞璜科学论文选集

《余瑞璜科学论文选集》编委会编

吉 林 大 学 出 版 社

1996

余瑞璜科学论文选集

《余瑞璜科学论文选集》编委会 编

责任编辑、责任校对：卢喜观		封面设计：张沐沉
吉林大学出版社出版 (长春市东中华路 29 号)		吉林大学出版社发行 吉林大学印刷厂印刷
开本：787×1092 毫米	1/16	1996 年 2 月第 1 版
印张：19.5	插页：6	1996 年 2 月第 1 次印刷
字数：442 千字		印数：500 册
ISBN 7-5601-1815-1/Z·57		定价：20.00 元

序

国际著名晶体学家、凝聚态物理学家、中科院院士、吉林大学物理系教授余瑞璜先生今年 90 高寿，余先生自 1929 年在清华大学物理系任教以来，在科研和教学领域辛勤耕耘 67 载，培养了大批人才，取得了丰硕的成果。

余先生一生从事 X-射线结晶学、金属物理和固体理论方面的研究。他于 1929 年做出了中国第一个盖革计数器，他的第一篇论文“关于氩的 X-射线的吸收和散射简报”说明了 X-射线的散射系数不同于经典散射系数，首次指出该系数是波长的函数。40 年代初期，余先生在物理学领域创立了“X-光晶体结构分析新综合法”，改进了原来的傅立叶分析效率低等缺点，利用 X-射线衍射相对强度数据，用更有效的数据处理，得到晶体结构中原子座标的更多的信息资料，并在国内外的《自然》、《科学记录》等期刊上发表了十多篇在国际晶体学界极有影响的开拓性论文。1939 年，余先生制出了我国第一个永久性医用真空 X-射线管，填补了国内空白；1964 年，在他的指导下研制成功我国第一台细聚焦 X-光机；1957 年以来，余先生针对现代固体理论，尤其是金属电子论中的一些矛盾，在用归纳法总结大量实验和理论研究资料的基础上，于 1978 年首次发表了“固体与分子经验电子论”，给出了计算价电子结构的键距差 (BLD) 方法。余先生在理论中通过对化合物中过渡元素原子的 s , p , d 价电子和等效 s , p 的 d 电子等进行了巧妙的区分，将鲍林 (Pauling) 的化学价键和 W. 休姆-罗瑟里 (Hume-Rothery) 的这些过渡元素化合中金属价键的矛盾统一起来了，阐明了休姆-罗瑟里电子浓度规则中过渡元素金属价为零价的物理实质，由此开拓了对固体中电子运动的新层次的、深入的认识。用此经验理论计算的晶格常数、结合能及熔点等与实验结果一致，并已在材料研究领域得到了应用。余先生的这一经验电子论源于实践，用于实践，开创了材料设计的新途径，将成为固体理论的重要研究方向。

几十年来，余先生都是以国家利益为重，选择自己的人生轨道。当他在英国曼彻斯特大学、伯明翰大学进行科研工作时，他的导师布拉格教授建议他到英国皇家研究所工作，为了祖国，他选择了回国。并于 1939 年春到昆明清华研究所、清华大学物理系任教授；1948 年作为中美两国交换科学家到美国加州理工学院，受到该院伯乐吉教授的挽留，当听到百万雄师过大江的消息时，他又选择了回国；1952 年，为了创建东北人民大学（现吉林大学）物理系，他放弃了优越的条件，选择了长春，担起了筹建重任，建立了实验室，创建了新学科，培养了大批优秀人材。

在余先生 90 寿辰时出版的这一论文集，集中了余先生各个时期的重要科研成果，值得我们很好地研读。

程开甲

1996 年 1 月 17 日于北京

前 言

余瑞璜先生出生于江西省宜黄县崇二都村。他在6—9岁读了私塾，10岁离家去30里外的崇文书院读高小。12岁他考取了江西临川省立第三师范学校。1925年他考入南京东南大学物理系。1929年以优异成绩毕业于原中央大学物理系，获得学士学位。

大学毕业后，他得到吴有训先生赏识，受聘于清华大学物理系任助教，在吴先生指导下从事教学、科研工作。

1935年他考取留英公费生，到英国曼彻斯特大学物理系学习，在诺贝尔奖金获得者、X-射线晶体结构分析创始人、布拉格定律发现者W. L. 布拉格(Bragg)教授指导下进行X-射线晶体结构分析研究。1937年获博士学位后，他的导师建议他去W. H. 布拉格(W. L. 布拉格之父)领导的英国皇家研究所做实验工作。但国内正是抗日战争时期，吴有训先生建议他学习国家急需的金属学后尽快回国。于是他先后在北威尔士大学进行X-射线金相学研究，在伯明翰大学学习金属学与热处理。1938年9月携眷返回了祖国。回国后在西南联合大学清华金属研究所进行研究工作，同时为矿物系学生讲授晶体结构。抗战胜利后，1946年随校北返，在清华大学物理系任教授，兼任北京大学地质系和北京师范大学教授。1948年8月他接受美国国务院法尔布瑞特美中交换教授讲座的邀请去波士顿麻省理工学院地质系进行讲学和研究。在途经加州理工学院时，受该院教授、著名化学家、诺贝尔奖金获得者L. 鲍林(Pauling)之邀，在该院作短期讲学和研究。当他将要离开加州时得悉解放军过了长江，祖国即将解放，他立即放弃去麻省理工学院讲学的机会，返回香港，到广州接家眷，经香港、天津到达北京。其后，在清华大学任教。

1952年他响应党的号召，离开工作了20多年的清华大学到东北人民大学(现吉林大学)筹建物理系，并建立了我国第一个金属物理专业。1955年被选为中国科学院学部委员。1957年被错划为“右派”。1960年着手“固体与分子经验电子理论”研究。十年动乱中，他在东北农村的土炕上写出了近百本研究笔记，用一台手摇计算机，建立了“固体与分子经验电子理论”。1978年后，余先生担任吉林大学物理系第一系主任，并兼任暨南大学、沈阳工业大学、吉林工业大学、原大连工学院等校教授，并先后任吉林大学物理系名誉主任、校学术委员会副主任，吉林省人民代表大会常务委员会副主任和民盟中央参议委员会常务委员等职。在余先生领导下，吉林大学凝聚态物理学科发展很快，第一批成为博士点，是首批博士后科研流动站之一。在余先生本人亲自指导下，许多学生已成长为学术骨干。

自1930年以来的60多年间，余瑞璜先生在物理学科研究中做出了许多重要贡献，有些结果达到了世界领先水平，受到同行们高度评价。

在清华大学时期，余瑞璜先生在康普顿效应验证者之一吴有训教授指导下，先是试制了一台康普顿二象静电仪，其灵敏度可测出三个电子。1929年盖革计数器制作方法在国外报道后，1930年余瑞璜先生就制出了中国第一台盖革计数器(当时在国外也只有德

国刚刚制成)。在它测量宇宙线强度时,发现计数不为定值。因他当时不知道宇宙线的照射规律,以为测量强度随时间起伏是仪器不准所致。经过半年夜以继日的反复修改仍无任何进展,这才怀疑是宇宙线本身强度可能不恒定。他用镭的 γ 射线作源,测量加上不同数目铅片后射线强度的变化及铅片不变时的射线强度是否不变,确定了仪器的可靠性。这段经历给了他极深刻的教育,使他认识到自然界的复杂性,也更激起了他探索自然规律的强烈愿望。这台盖革计数器很快用于科研和现代物理实验教学中。1932年他发表了第一篇学术论文“关于氩的X-射线的吸收和散射简报”,论文不久就被康普顿效应的发现者A. H. 康普顿(Compton)教授在他的著作《X-射线的理论与实验》(X-rays in theory and experiment, 1935)中引用,以说明X-射线的散射系数不同于经典散射系数。

1935—1937年余瑞璜先生在布拉格教授指导下进行了复杂晶体结构的分析研究。他用摆动晶体X-射线谱仪分析了溴酸锌和硝酸镍氨的晶体结构。为使单晶体在摆动时受到均匀照射,他改进了谱仪的摆动。这项改进对需要均匀摆动的装置有普遍意义,曾被国外学者采用。他用傅里叶综合法分析了溴酸锌的晶体结构。在用傅里叶综合法定出溴原子坐标后,又实际观察到原子的第一衍射环。他创造性地用晶体的傅氏综合图减去溴的这一衍射环,消除了“鬼影”,接着又对溴锌原子做类似处理。用这个方法他首次解决了结构分析中的“鬼影”问题。布拉格教授对他这一贡献给予了很高评价。在对硝酸溴氨分析时他发现了室温下 NO_3 基团的反常热振荡,在博士论文答辩时也受到了布拉格教授的赞赏。

1939年在西南联合大学清华金属研究所,余瑞璜先生研制出了我国第一台连续抽空X-射线管,并用它重复了印度C. V. 拉曼(Raman)刚发现的氯化钠弥散衍射实验;分析了云南、贵州两省的硬铝石铝矿。

在30—40年代,用X-射线衍射强度确定晶体中原子坐标参数有两种方法,即傅里叶综合法和帕特逊综合法。这些方法都由于“鬼影”而影响原子位置的精确确定。余瑞璜先生回国后针对这一问题成功地提出了一种新方法,即晶体分析X-射线数据的新综合法。继之,他又提出了一种由相对X-射线强度资料确定绝对强度而不需实验工作的方法。当此二文投到英国的《自然》杂志后,为该刊物审稿的国际晶体学杂志总编辑A. J. C. 威尔逊(Wilson)对论文“由相对X-射线强度资料确定绝对强度”产生了极大兴趣。论文发表时,威尔逊在该文后同一标题写了一篇文章。余瑞璜先生指出:按新综合法,利用X-射线衍射线的绝对强度 $|F(h)|^2$ 与相对强度 $H(h)$ 关系的公式 $H(h)=C|F(h)|^2$,决定晶体中原子位置参数的绝对强度 $|F(h)|^2$ 的值,可近似地从实验给出的相对强度 $H(h)$ 导出,而无需进行任何测定绝对强度的实验,只需确定一个待定常数 C 。文中并给出了计算 C 的公式。威尔逊接着对 C 的确定做了进一步讨论。余瑞璜先生的这一工作受到国际晶体学界极大重视。1978年英国皇家学会会员、曼彻斯特大学教授H. 利普森(Lipson)在给余瑞璜先生的信中指出,“战争时期你在《自然》杂志上发表的论文开辟了强度统计学整个科学项目”;此后威尔逊的来信则说,他在余瑞璜先生之后的那篇文章是自己最重要的文章,被广泛引用。围绕新综合法,余瑞璜先生曾先后发表了10余篇论文,而成为X-射线晶体结构分析强度统计学的奠基人之一。

1950年为救护朝鲜战场上的志愿军伤员,他制做了我国第一个永久性医用真空X-

射线管。

余瑞璜先生在 X-射线晶体学方面的贡献得到了国际晶体学界的承认。1962 年国际晶体学会出版的《X-射线衍射五十年》这一总结晶体科学发展历史的史册中就有三处提到了余瑞璜先生的名字。该书总编辑 P. R. 埃瓦尔德 (Ewald) 指出：“我对中华人民共和国知之甚少，但知道在那里有着第一流的晶体学家，比如余瑞璜先生 (S. H. Yu)”。

固体电子结构问题，多年来一直是凝聚态物理学的基本问题。余瑞璜先生用归纳法在总结大量实验和理论研究资料的基础上，在 1978 年首次发表了一个经验电子理论——固体与分子经验电子理论。他提出四个基本假设：(1) 在固体与分子中，每一个原子一般由两种原子状态杂化而成。这两种状态叫做 h 态和 t 态，每种元素至少在一种杂化态中有一个态在基态或靠近基态的激发态。两个态都有自己的共价电子数 n_c 。在金属元素中至少有一态含“晶格电子”(n_l)；在共价和含部分离子性的共价结构中总有相应的单键半距 $R(1)$ 。(2) 在一般情况下，状态杂化是不连续的。若 C_t 表示 t 态在杂化状态中的成分，则在多数结构中， C_t 将由下式给出： $C_t = 1/1 + K^2$ ，其中 K 是 h 和 t 态中 s 、 p 、 d 的共价与晶格电子数的函数。(3) 除完全离子性晶体（如氯化钠）外，结构中两个相近原子 u 和 v 之间总有共价电子对存在，这种对数将用 n_a 表示，两个原子间距离即共价键距表示为 $D_{uv}(n_a)$ 。按鲍林的理论为 $D_{uv}(n_a) = R_u(1) + R_v(1) - \beta \lg n_a$ 。(4) 对 B 族元素，含过渡金属及 Ga, In, Tl，在固体中它们的原子有一部分外层 d 电子在空间扩展，以致它对共价键距的影响等效于最外层的 s 或 p 电子的作用；对于 Cu, Ag 和 Au, p 价电子取向在不同单胞中混乱分布，以致其平均效果与 s 电子等效。但所有等效电子在对结合能的贡献上总保持原有特性。同时，他还给出了一个用经验电子理论计算价电子结构的方法，即键距差 (BLD) 方法。国内已有数十名中高级科学工作者在进行经验电子理论方面的研究。最重要的进展是余瑞璜先生对电子化合物中过渡元素化合价的研究。他通过对化合物中过渡元素原子中的 s 、 p 、 d 价电子，等效 s 、 p 的 d 电子等的巧妙分析，把鲍林和 W. 休姆-罗瑟里 (Hume-Rothery) 对这些过渡元素化合价的互相矛盾的理论统一起来了，同时揭示了休姆-罗瑟里电子浓度规则中过渡元素为零价的物理实质。由余瑞璜先生给出的这个微观精细价电子结构图象计算方法，被应用于计算晶体结合能、熔点、高压相变的转变压强、合金相图等，都与实验结果吻合得很好。

今年是我们尊敬的老师余瑞璜先生 90 寿辰。作为老一代著名科学家，余先生 60 多年来为我国物理学事业的发展做出了卓越贡献。在余先生 90 寿辰之际，我们收集了余先生在各个时期的部分有代表性的论文，并且影印出版，以保持论文的历史原貌。在此编委会的全体同仁衷心祝愿余先生健康长寿。

编委会

1996 年 3 月

余瑞璜随笔

我在小学上数学课的时候，堂兄余达齐教数学很生动吸引着我。在中学念物理课的时候，傅选生老师许多课堂上的表演，如用水电法分裂水为氧和氢，及感应机发电等等。这些生动的教学引导我下决心学物理。在科学研究方面也有终生不能忘怀的教育，那就是主观主义。我在制造中国第一个盖革计数器时，本来制造得很好，但是宇宙线给我的计数，总是不连续的，一会儿计数很少，一会儿又连续不断像一阵雨一样。由于主观上对宇宙线没有认识，所以总把这种零乱的一阵一阵的快慢，看作是计数器有毛病。所以左改改，右改改，搞了几个月。有一天忽然想起这是宇宙线本身零乱放射，因此把镭放在铅做的盒子里，上面盖几块铅片。这样的镭的射线穿过同一数目的铅片上的盖革计数就均匀，从而才认识到零乱计数是由于宇宙线的散射零乱和计数器无关。老一辈的清华毕业生都会记得这个计数器做镭的铅吸收率的实验。这一个在人的脑海里的主观主义，对于我以后许多实验，都起了启发作用。例如我做 $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$ 晶体结构的时候，看到高角度 X-光衍射线的强度逐步减弱，这和平常结构的衍射线不同。后者在高角度线的强度是不会减弱的。因此我就抛弃了主观主义而考虑到这种减弱是由于 NO_3 集团在晶体中左右摆动。这种在晶体周期违反的结构影响了高角度衍射的强度。计算结果果然如此。为了检验这一点，做了低温的 $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$ 的晶体结构分析。果然 NO_3 原子集团在低温下停止摆动，就使得高角度衍射线，由于周期性的恢复，所以强度也就增强。原来的摆动晶体仪，探制摆动的摆片是对称的，我从几何法得出应是非对称的，从而克服了晶体在摆动时的非均匀性。这也是主观主义的教训。

科学研究方面，我首先是“关于氩的 X-射线的吸收与散射”。论文发表不久就被康普顿教授在他的“X-射线的理论与实验”中引用。1935—1937 年在英国曼彻斯特大学布拉格实验室用摆动晶体 X-射线谱仪分析了 $\text{Zn}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 和 $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$ 的晶体结构。改进了谱仪的摆轮。这项改进对需要均匀的装置有普遍意义，曾被国外采用。用傅里叶分析 $\text{Zn}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 时定出了 Br 原子坐标后，又实际观察到 Br 原子的第一衍射环。然后用傅里叶综合图减去 Br 的这一衍射环，消除了“鬼影”。接着又将 Br、Zn 原子做类似的处理。用这个方法首次解决了结构分析中的“鬼影”问题。布拉格教授对这一工作曾给予很高评价。在对 $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$ 分析发现室温下 NO_3 的基团的

反常振荡，在博士论文答辩时也受到了布拉格教授的赞赏。

由于傅里叶和帕特逊综合法都因“鬼影”而影响原子的精确测定，所以30—40年代我提出了一种新方法。继之我又提出了一种由相对强度资料确定绝对强度而不需实验工作的方法。这两篇文章在英国 Nature 杂志发表后，受到国际结晶学界极大重视。首先审稿人国际结晶学杂志总编辑 A. J. C. Wilson 在“从相对强度测定绝对强度”同一标题下发表了他的文章说受到我的文章的启发。1978年英国皇家学会会员、曼彻斯特大学教授 H. Lipson 在给定的信中指出：“战争时期你在 Nature 上发表的论文开辟了强度统计学整个科学项目。”此后 Wilson 来信说：他在我的文章之后的文章，是他自己最重要的文章，被广泛引用。我在 X-射线晶体学方面，得到国际结晶学界的承认。1962年国际结晶学会出版的“X-射线衍射五十周年”这一总结晶体科学发展的史册中就有三处提到我的工作。该书总编辑 P. R. Ewald 指出：“我对中华人民共和国知之甚少，但知道那里有着第一流的结晶学家，比如余瑞璜 (S. H. Yu)。”

自1960年以来从事固体与分子经验电子理论方面的研究。固体电子结构问题，多年来一直是凝聚态物理的基本问题。我用归纳法在总结大量实验和理论研究资料的基础上，在1978年首次发表了名叫“固体与分子经验电子理论”。提出四个假定和一个键距差 (BLD) 分析法。国内已有数十名高级科学工作者在进行经验电子理论的应用方面的研究。一个重要进展，是对电子化合物中过渡元素化合价的研究。通过对化合物中过渡元素原子中的 s, p, d 价电子，等效 s, p 的 d 电子的分析，把鲍林和休姆-罗瑟里 (Hume-Rothery) 对这些过渡元素化合价的互相矛盾的理论统一起来。同时揭示了休姆-罗瑟里电子浓度规律中过渡元素为零价的物理实质。由这个微观精细价电子结构图象，计算的晶格常数、结合能以及熔点都和实验结果一致。

一生受到深刻的教育都是我的老师吴有训先生所给予的。当我第一次到他的实验室的时候，竟然看见他身穿工作服做木工，刨木板做材料装起栅栏，把高压变压器放在里头。第二个印象最深刻的是伟大的卢瑟夫的 α -射线的静电器。卢氏先生的 α -射线实验多么出名。但他测量静电荷的静电器竟然是自己用金属薄片包围成的小盒子。这个盒子就放在我工作间的桌子上，使我天天可以看到。

1994年6月

目 录

第一部分 X-射线衍射与晶体结构分析

1. Note on Absorption and Scattering of X-rays by Argon
S. H. Yu, Sci. Rep., Tsing-hua Univ., 1 (1932) 155 (2)
2. Zink Bromate-Hexahydrat, $\text{Zn}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
S. H. Yu, and C. A. Beevers, Z. Kristallgr. (A) 96 (1936) 194 (5)
3. Evidence of Abnormal Behaviore of NO_3 in Cubic Crystal, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$
S. H. Yu, Nature, 141 (1938) 158 (7)
4. A New Synthesis of X-ray Data for Crystal Analysis
S. H. Yu, Nature, 149 (1942) 638 (11)
5. A New X-ray Synthesis
S. H. Yu and C. P. Ho, Nature, 149 (1942) 729 (15)
6. Determination of Absolute from Relative X-ray Intensity Data
S. H. Yu, Nature, 150 (1942) 151 (16)
7. Formation of a Double Crystal Aggregate and the Structure of the Intermediate
Temperature Modification of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{NH}_3$
S. H. Yu, Nature, 150 (1942) 347 (18)
8. A New Method of Analysis of X-ray Data for the Determination of Crystal
Structure—Its Application to Iron Pyrites
S. H. Yu and C. P. Ho, Sci. Rec, Aca. Sin., 1 (1943) 111 (22)
9. The Space Group of $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{NH}_3$, $\text{NiBr}_2 \cdot 6\text{NH}_3$ And $\text{NiI}_2 \cdot 6\text{NH}_3$
S. H. Yu, Sci. Rec., Aca. Sin., 1 (1943) 151 (27)
10. An Improved Algebraic Method for the Determination of Crystal Structure
from X-Ray Data
S. H. Yu, Sci. Rec., Aca. Sin., 1 (1943) 109 (28)
11. X-Ray Analysis of the Structure of KH_2PO_4 by the Improved Algebraic
Method for Crystal Analysis by X-Rays
S. H. Yu, Sci. Rec., Aca. Sin., 1 (1944) 361 (30)
12. New Development on the Correlation Matrix for Crystal Analysis by X-Rays
S. H. Yu, Sci. Rec., Aca. Sin., 1 (1944) 356 (33)
13. Determination of Absolute Intensities of X-ray Reflexions from Relative
Intensity Data
S. H. Yu, Nature, 163 (1949) 375 (38)

第二部分 固体与分子经验电子理论

14. 固体与分子经验电子理论
余瑞璜, 科学通报, 23 (1978) 217 (44)
15. 铝-镁二元金相 α, δ 相以及 $\gamma\text{-Al}_{12}\text{Mg}_{19}$ 相的价电子结构分析
余瑞璜, 吉林大学自然科学学报, 4 (1979) 54 (52)
16. Periodic Table in the Microscopic Space of Solids and Molecules—Fine Structure of Atomic Valence: I Subgroup B I, B II, A III Elements, in the Periodic Table
S. H. Yu, Science Reports, Special Bulletin, No. 1, P. 7.
Jinan Univ., (1981) (75)
17. Periodic Table in the Microscopic Space of Solids and Molecules—Fine Structure of Atomic Valence: II. Subgroup AV Elements As, Sb and Bi in the Periodic Table
S. H. Yu, Science Reports, Special Bulletin, No. 1, P. 26.
Jinan Univ., (1981) (94)
18. Quantum Mechanical Foundation of Discontinuous States Hybridization Hypothesis in the Empirical Electron Theory of Solids and Molecules
S. H. Yu, Science Reports, Special Bulletin, No. 1, P. 30.
Jinan University (1981) (98)
19. Analyses of the Valence Electron Structure of Mg and Some Mg and Ag hcp Solid Solutions in Phase Transformation Under Critical High Pressure—Direct Evidence of the Existence of Discontinuous Hybridization of States in Solids
S. H. Yu, Science Reports, Special Bulletin, No. 1, P. 41.
Jinan Univ., (1981) (109)
20. 固体与分子经验电子理论——等效价电子假定
余瑞璜, 科学通报, 26 (1981) 206 (123)
21. $\alpha\text{-Fe}$, $\gamma\text{-Fe}$ 和 Fe_4N 的价电子结构和磁矩结构分析—— $\alpha\text{-Fe} \rightarrow \gamma\text{-Fe}$ 相变、高温渗氮表面硬化、渗碳体石墨化及其它材料的电子理论
余瑞璜, 金属学报, 18 (1982) 337 (127)
22. 奥氏体低温分解形成下贝氏体中的 $\epsilon\text{-Fe}_3\text{C}$ 相的价电子结构分析
余瑞璜、张瑞林, 金属学报, 18 (1982) 444 (141)
23. Fe-C 马氏体价电子结构分析
张瑞林、余瑞璜, 金属学报 20 (1984) A 279. (148)
24. 铁-碳、铁-氮系中几种固溶体的研究 I —— $\gamma\text{-Fe-C}$ 固溶体的价电子结构与 $a \sim x$ 曲线
余瑞璜、张瑞林、金冶, 吉林大学自然科学学报, 1 (1984) 51. (155)

25. 铁-碳、铁-氮系中几种固溶体的研究 II —— γ -Fe-N 固溶体的价电子结构与 $a \sim x$ 曲线
金冶、张瑞林、余瑞璜, 吉林大学自然科学学报, 1 (1984) 56 (164)
26. 铁-碳、铁-氮系中几种固溶体的研究 III —— ϵ -Fe-N 固溶体的价电子结构与品格常数~成分曲线
张瑞林、金冶、余瑞璜, 吉林大学自然科学学报, 1 (1984) 63 (169)
27. CrO_3 , δ - CrO_2 , Cr_2O_3 , α - Al_2O_3 的熔点、沸点和在水中及其它溶液中溶解度的电子理论
余瑞璜, 结构化学, 3 (1984) 193 (179)
28. Fe-Cr σ 相价电子结构的分析
袁祖奎、余瑞璜, 金属学报, 21 (1985) A 140 (196)
29. 稀土镁球墨铸铁的共格球化
余瑞璜、刘兆芸, 金属学报, 21 (1985) A 64 (203)
30. 金属化合物 Ti_3Al 的价电子结构及其力学性能
刑胜娣、余瑞璜, 吉林大学自然科学学报, 1 (1985) 62 (208)
31. 钢系元素单键半径 $R(1)$ 公式——固体与分子经验电子理论扩展到周期表第七周期应用所需参数
陈秀芳、余瑞璜、左秀忠, 科学通报, 31 (1986) 663 (217)
32. Fe-C-Cr-Si 合金的价电子结构与奥氏体相变动力学
余瑞璜、张瑞林、屈庸博、戴天时、刘志林, 吉林工业大学学报,
4 (1987) 73-81 (221)
33. Electron Theory of Superconductivity and Transition Point T_c 's of $\text{Ti}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$ ($n=1, 2, 3, 4$) and Comparison with T_c 's of $\text{TiBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+3}$ ($n=1, 2, 3, 4, 5$)
Ruihuang (S. H.) Yu, at the 1987 International Topical Meeting on High- T_c Superconductivity, Beijing, China and Published in Progress in. High Temperature Superconductivity Vol. 2 (1987) 494-496 [WorldScientific Publishing Co. Inc. 687 Hartwell ST. Teaneck NJ 07666. U. S. A.] (230)
34. Fe-C-Cr-Si(Ni, W) 合金中的 C-Mc 偏聚对奥氏体相变的影响
屈庸博、杨双良、刘志林、余瑞璜、张瑞林, 金属科学与工艺,
1 (1988) 8-18 (233)
35. 过渡金属化合物晶体结合能计算
徐万东、张瑞林、余瑞璜, 中国科学, 3 (1988) 323 (244)
36. 由 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的晶体结构直接给出其价电子结构的分析
张瑞林、吴尚才、余瑞璜, 中国科学, 2 (1988) 197 (252)
37. Al 型多元固溶体价电子结构的计算
余瑞璜、刘志林, 金属科学与工艺, 7 (1988) 1 (259)
38. Ag-Au、Au-Cu 二元合金形成能和高温相图的研究

郑伟涛、张瑞林、余瑞璜,科学通报,9 (1989) 705	(266)
39. Fe-Mn 合金高温相图的电子理论计算	
吴非、余瑞璜、张瑞林,中国科学,8 (1990) 889	(270)
40. Cu-Au 二元合金有序-无序相平衡研究	
郑伟涛、余瑞璜、张瑞林,科学通报,2 (1991) 179	(278)
41. 金属间化合物 BiU 价电子结构分析——固体与分子经验电子理论应用(I)	
余瑞璜,吉林大学自然科学学报,特刊 (1992) 113	(281)
42. The Fracture of Transgranular Cleavage of Fe ₃ Al and the Intergranular Fracture of FeAl	
Zhang Jian-Min, Zhang Rui-Lin. Yu Rui-Huang, Chinese Science Bulletin, 39 (1994) 1315	(286)
43. 氢致 α -Fe 脆性机理的电子理论研究	
张建民、张瑞林、余瑞璜,科学通报,40 (1995) 234	(290)
44. 四种过渡族氧化物 Hubbard 参数的计算	
欧阳京、丁涛、郑伟涛、张瑞林、余瑞璜,吉林大学自然科学学报, 特刊(1995)	(293)

第 一 部 分

X-射线衍射与晶体结构分析

NOTE ON ABSORPTION AND SCATTERING OF X-RAYS BY ARGON

By S. H. Yu(余瑞璜)

Department of Physics

Recently A. H. Compton¹ has shown that the intensity of X-rays scattered by an atom at an angle Φ to a distance R is given by

$$I_{\Phi} = \frac{Ie^4(1 + \cos^2\Phi)}{2R^2m^2c^4} \left\{ F^2 + \frac{Z - F^2/Z}{[1 + 8(1 - \cos\Phi)]^3} \right\} \quad (1)$$

where I is the intensity of the primary beam, F is the atomic structure factor, $8 = h/mc \lambda$ and Z, e, m, c, h and λ have their usual significance. Woo² has actually compared Eqn. (1) with the experiments of Barrett³, Scherrer and Staeger⁴ and Wollan⁵. The agreement seems to be quite satisfactory. It appears therefore that by means of Compton's formula the scattering coefficient of monatomic gas can be evaluated numerically. In the present note a calculation is made of the scattering of X-rays by argon and the results are discussed with the absorption measurements made by Colvert⁶.

By definition, the atomic scattering coefficient σ_a is given by

$$\sigma_a = \int_0^\pi \frac{I_{\Phi}}{I} 2\pi R^2 \sin\Phi d\Phi \quad (2)$$

In order to evaluate this integral, it is necessary to find the F -curve for the scattering atom. In the present work the F values are calculated according to the Thomas-Fermi method, which has been recently discussed in detail by Debye⁷ and Woo⁸. Following the notations employed in Woo's paper, the writer has evaluated accurately the values of ψ for the interval $0 \leq j < 3.85\pi$ and the results are tabulated in the Appendix.

Using the values of F obtained from the Appendix by the relation $F = Z\psi$, the atomic scattering coefficients of argon for wavelengths ranging from 0.148 Å to 2.288 Å are evaluated graphically according to Equ. (2). The theoretical values of σ_a together with the atomic absorption coefficients found by Colvert⁶ are given in Table 1. It is seen that the atomic scattering coefficient is an increasing function of the wave-length, a result which seems to be demanded experimentally⁹.

Table 1.

$\lambda(\text{\AA})$	BiK β	BiK α	WK β	WK α	AgK β	AgK α	MoK β	MoK α	CuK β	CuK α	CrK α
	0.142	0.163	0.184	0.211	0.496	0.561	0.613	0.710	1.389	1.539	2.288
$\sigma_a \times 10^{23}(\text{cm}^2)$	0.938	1.018	1.100	1.200	2.280	2.540	2.843	3.176	5.944	6.588	9.121
$\mu_a \times 10^{23}(\text{cm}^2)$ (Colvert)	-	-	-	-	33.3	45.3	64.5	85.4	564	750	2233
$\tau_a \times 10^{23}(\text{cm}^2)$ $= (\mu_a - \sigma_a)(\text{cm}^2)$	-	-	-	-	31.0	42.8	61.7	82.2	558	743	2224

By plotting the logarithms of the atomic scattering coefficients against the logarithms of the wave-lengths, it is shown that in general there exists no simple relation between σ_a and λ . However, for wave-lengths between 0.35 Å and 2.00 Å the relation between σ_a and λ is well represented by the expression

$$\sigma_a = 0.044 \times 10^{-21} \lambda^{0.94}$$

When correlated with the total atomic absorption coefficients of argon determined by Colvert, the true atomic absorption coefficient τ_a is found to be represented by the equation

$$\tau_a = 2.20 \times 10^{-21} \lambda^{2.8}$$

Thus for wave-lengths between 0.35 Å and 2.00 Å the absorption formula for argon can be written as

$$\mu_a = 2.20 \times 10^{-21} \lambda^{2.8} + 0.044 \times 10^{-21} \lambda^{0.94}$$

where μ_a is the total atomic absorption coefficient. This indicates that we should not attach too much physical significance to the empirical absorption formula referred to as Owen's law.

In conclusion the writer wishes to express his thanks to Prof. Y. H. Woo for his suggestions and encouragement.

Appendix

j	ψ	ψ^2	j	ψ	ψ^2	j	ψ	ψ^2
0.00 π	1.0000	1.0000	0.70 π	0.2248	0.0505	1.45 π	0.0964	0.0093
0.025 π	0.9760	0.9726	0.75 π	0.2132	0.0455	1.50 π	0.0948	0.0090
0.05 π	0.9240	0.8538	0.80 π	0.1964	0.0386	1.55 π	0.0908	0.0082
0.10 π	0.7944	0.6311	0.85 π	0.1824	0.0333	1.60 π	0.0876	0.0077
0.15 π	0.6816	0.4645	0.90 π	0.1704	0.0290	1.65 π	0.0820	0.0067
0.20 π	0.5864	0.3439	0.95 π	0.1600	0.0256	1.70 π	0.0792	0.0063
0.25 π	0.5240	0.2746	1.00 π	0.1520	0.0231	1.75 π	0.0764	0.0058
0.30 π	0.4696	0.2205	1.05 π	0.1448	0.0210	1.80 π	0.0736	0.0054
0.35 π	0.4184	0.1751	1.10 π	0.1356	0.0184	1.85 π	0.0712	0.0051
0.40 π	0.3756	0.1411	1.15 π	0.1296	0.0168	1.90 π	0.0672	0.0045
0.45 π	0.3372	0.1137	1.20 π	0.1224	0.0150	1.95 π	0.0656	0.0043
0.50 π	0.3100	0.0961	1.25 π	0.1192	0.0142	2.00 π	0.0644	0.0041
0.55 π	0.2840	0.0807	1.30 π	0.1112	0.0124	3.85 π	0.0256	0.0007
0.60 π	0.2608	0.0680	1.35 π	0.1036	0.0107			
0.65 π	0.2400	0.0576	1.40 π	0.0984	0.0097			

References

1. A. H. Compton, *Phys. Rev.*, 35, 925, 1930.
2. Y. H. Woo, *Nature*, Oct, 4, 1930; April, 11, 1931; These Reports, Vol. 1, No. 2 and this number. The difference between Fand F' as pointed by Jauncey is neglected in this calculation.
3. C. S. Barrett, *Phys. Rev.*, 32, 22, 1928.
4. Scherrer and Staeger, *Helv. Phys. Acta* I, 518, 1928.
5. E. O. Wollan, *Phys. Rev.*, 37, 862, 1931.
6. W. W. Colvert, *Phys. Rev.*, 36, 1619, 1930.
7. P. Debye, *Phys. Zeits.*, 31, 419, 1930.
8. Y. H. Woo. These Reports, 1, 55, 1931.
9. C. f. A. H. Compton, "X-rays and Electrons" chaps. I and VI.