

## 비정질 고체에 대한 X선의 다중 산란 강도

박성수 · 장윤식 · 류봉기 · 박희찬

부산대학교 공과대학 무기재료공학과

(1996년 12월 23일 접수)

### The Intensity Scale of Multiple Scattering of X-rays in Non-Crystalline Solids

S. S. Park, Y. S. Chang, B. K. Ryu and H. C. Park

Department of Inorganic Materials Engineering,  
Pusan National University

(Received December 23, 1996)

#### 요 약

흡수계수가 매우 낮은 비정질 재료의 구조 해석을 하기 위하여 표준 X선 회절 기법을 이용했을 때, 시료의 측정된 X선 회절 강도에는 다중 산란에 의해 발생하는 X선 강도가 상당히 포함된다. 비정질  $\text{SiO}_2$ 와  $\text{B}_2\text{O}_3$ 에서 사용되는 빔의 종류에 따라 발생하는 다중 산란 빔의 강도를 산출해 주는 컴퓨터 프로그램을 작성하였다. 여러 종류의 X선 빔과 시료  $\text{SiO}_2$ 와  $\text{B}_2\text{O}_3$ 의 조합을 작성된 컴퓨터 프로그램을 도입하였을 때,  $2\theta=0\sim 180^\circ$ 의 범위에서 시료  $\text{SiO}_2$ 의 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비는  $\text{CuK}\alpha$ 빔; 0.10~0.16%,  $\text{MoK}\alpha$ 빔; 0.98~5.87%,  $\text{AgK}\alpha$ 빔; 1.88~17.86%로 계산되어졌고, 시료  $\text{B}_2\text{O}_3$ 에 대한 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비는  $\text{CuK}\alpha$ 빔; 0.27~0.54%,  $\text{MoK}\alpha$ 빔; 2.30~19.69%,  $\text{AgK}\alpha$ 빔; 3.96~53.83%로 계산되어졌다. 따라서, X선 회절 기법을 이용하여 비정질  $\text{SiO}_2$ 와  $\text{B}_2\text{O}_3$ 의 구조 해석에 있어서는,  $\text{MoK}\alpha$ 빔 및  $\text{AgK}\alpha$ 빔에서 측정된 X선 회절 강도는 다중 산란 효과에 대해서 반드시 교정하여야 한다.

#### ABSTRACT

When the intensity of X-rays scattered from amorphous materials (very weakly absorbing materials) is measured using standard diffractometric technique, the intensity caused by multiple scattering is obtained in the measured X-ray intensity. Computer programs have been developed to estimate the intensity of the multiple scattering obtained in vitreous  $\text{SiO}_2$  and  $\text{B}_2\text{O}_3$  with various X-rays. Using the above computer program, the intensity ratios of multiple scattering to single scattering in vitreous  $\text{SiO}_2$  were 0.10~0.16% at  $\text{CuK}\alpha$ , 0.98~5.87% at  $\text{MoK}\alpha$ , and 1.88~17.86% at  $\text{AgK}\alpha$  in the range of  $2\theta=0\sim 180^\circ$ . Those in the vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$  were 0.27~0.54% at  $\text{CuK}\alpha$ , 2.30~19.69% at  $\text{MoK}\alpha$ , and 3.96~53.83% at  $\text{AgK}\alpha$  in the range of  $2\theta=0\sim 180^\circ$ . Therefore, prior to the structural analysis of vitreous  $\text{SiO}_2$  and  $\text{B}_2\text{O}_3$  performed experimentally using X-ray diffractometric technique, the intensity data measured in  $\text{MoK}\alpha$  and  $\text{AgK}\alpha$  radiations must be corrected for multiple scattering effect.

**Key words :** X-rays, Multiple, Scattering, Vitreous solids

#### 1. 서 론

비정질 고체의 구조 분석에는 적외선(IR),<sup>1)</sup> 라만(Raman),<sup>2)</sup> 또는 핵자기공명(NMR)<sup>3)</sup> 분광법 등이 이용되고 있다. 그렇지만, 이들 분광 분석법은 특정 원자 위치에 대한 대칭성 및 주위의 원자 수에 대한 정보만을 제공할 따름이다. 한편, X선 회절법<sup>4,5)</sup> 또는 중심자

회절법<sup>6)</sup>은 반경 분포 함수(radial distribution function) 또는 쌍 함수 분포(pair function distribution) 등의 수학적 해석법을 이용하여 측정된 회절 강도 데이터로부터 원자들 간의 거리, 원자들 간의 결합각 및 배위수 등 비정질 고체의 직접적인 구조 해석이 가능하다.

X선 회절법으로 단거리 규칙성을 가지는 비정질 고

체의 올바른 구조 해석을 하기 위해서는 높은 회절 각도에서 발생하는 정밀한 X선 회절 강도 데이터가 요구된다. 그렇지만, 측정 강도 데이터로부터 공기 산란, 기계적 퍼짐(instrumental broadening), 변칙 분산(anomalous dispersion), 편광, Compton 산란 및 다중 산란 등이 포함되어 있어, 이것들에 대하여 교정할 필요가 있다. 특히, 짧은 파장의 X선 빔을 이용하여, X선 흡수계수가 매우 낮은 비정질 재료로부터 측정된 X선 회절 강도 데이터에는 다중 산란에 의해 발생하는 부분이 큰 비중을 차지한다. 따라서, 다중 산란에 의하여 발생하는 회절 강도를 구하기 위하여, Chandrasekhar<sup>7)</sup>는 X선 회절 실험에 간접적으로 적용할 수 있는 다중 산란에 관한 수식을, Vineyard<sup>8)</sup>는 중성자 회절 실험에서 발생하는 다중 산란 빔의 강도를 계산하는 수식을 유도하였다. Warren 및 Mozzi<sup>9)</sup>는 기하학적 반사 조건하에서 충분히 두꺼운 시료 내에서 발생하는 다중 산란 강도의 산술적 계산치를 나타내는 수식을 제시하고, 이 수식을 비정질 실리카에 대하여 적용한 결과, CuK $\alpha$ 빔을 사용할 경우에는 Bragg 각도  $2\theta=0^\circ\sim 180^\circ$  범위에서 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비는 무시할 정도로 작고, RhK $\alpha$ 빔을 사용할 경우에는 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비는 약 0.08 정도가 된다고 보고하였다. 또한, Meek<sup>10)</sup>은 AgK $\alpha$ 빔을 사용할 경우 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비가 0.09~0.11 정도가 된다고 보고하였다. 비정질 고체의 구조 해석을 하기 위하여 CuK $\alpha$ 빔과 MoK $\alpha$ 빔을 주로 사용하고 있지만, 비정질 시료 내에서 발생하는 다중 산란 빔의 강도에 대하여 계통적으로 보고된 논문은 거의 없다.

따라서, 본 연구에서는 비정질 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 의 구조 해석을 하기 위하여 CuK $\alpha$ 빔과 MoK $\alpha$ 빔 또는 AgK $\alpha$ 빔의 조합에 의하여 측정된 강도 데이터로부터 쌍 함수 분포(pair function distribution)를 이용하기 이전에, 시료 내에서 다중 산란 효과에 의해 발생하는 오차 항을 측정 강도 데이터로부터 교정하기 위하여 Warren 및 Mozzi 방법<sup>9)</sup>과 Dwiggin의 Q함수<sup>11)</sup>를 응용하여 다중 산란 빔의 강도를 구하는 Fortran언어용 컴퓨터 프로그램을 작성하였다. 이 컴퓨터 프로그램으로부터 CuK $\alpha$ , MoK $\alpha$  및 AgK $\alpha$ 빔의 조건하에서 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에서 발생하는 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비를 산출하였다.

## 2. 이 론

무한히 두꺼운 시료 내에서 X선 회절이 일어날 때 기하학적인 반사 조건에서 다중 산란 빔의 강도를 계산하

는 이론적 근거가 Warren 및 Mozzi<sup>9)</sup>에 의하여 다루어졌다. 시료 내에 존재하는 한 전자로부터 거리 R에서의 단일 산란 빔의 강도 I $_0$ 는 식(1)과 같다.

$$I_0 = I_0 A_0 \left( \frac{e^4}{m^2 c^4} \right) \frac{1}{R^2} \left( \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \right) J(2\theta) \frac{n}{2\mu} \quad (1)$$

여기서 I $_0$ =입사 빔의 강도, A $_0$ =초기 단면적, e=전자의 전하, m=전자의 질량, c=빛의 속도,  $2\theta$ =산란 빔의 각도,  $\mu$ =X선 흡수 계수, n= 단위 부피당 존재하는 단위 포의 수, J( $2\theta$ )= $2\theta$ 의 산란 각도에서 단위포당 산란 빔의 강도이다.

다중 산란 빔의 강도를 구하기 위하여 dI $_r$ 을 시료 중의 주어진 체적 dV $_1$ 에서 입사 빔의 산란에 기인하여 dV $_1$ 으로부터 거리 r에서 발생하는 산란 강도라고 가정하면 dI $_r$ 은 식(2)와 같이 주어진다.

$$dI_r = I_0 \frac{e^4}{m^2 c^4 r^2} J(2\theta_1) n dV_1 \quad (2)$$

여기서 J( $2\theta_1$ )은  $2\theta_1$ 의 산란 각도에서 시료 내의 단위포당 산란 빔의 강도이다. dI( $2$ )가 체적 dV $_2$ 에서 dI $_r$ 의 산란에 기인하여 시료로부터 거리 R에서 발생하는 산란 빔의 강도라고 가정할 때 dI( $2$ )는 식(3)과 같이 주어진다.

$$dI(2) = dI_r \frac{e^4}{m^2 c^4 R^2} J(2\theta_2) n dV_2 \quad (3)$$

여기서 J( $2\theta_2$ )는  $2\theta_2$ 의 산란 빔의 각도에서 단위포당 산란 빔의 강도이다. 따라서, 다중 산란 빔의 강도 I $_m$ 은 식(3)의 적분에 의해 식(4)와 같이 주어진다.

$$I_m = \iint I_0 \left( \frac{e^4}{m^2 c^4} \right)^2 \frac{1}{r^2 R^2} J(2\theta_1) J(2\theta_2) n^2 dV_1 dV_2 \quad (4)$$

단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비를 계산하기 위해서는, Warren 및 Mozzi<sup>9)</sup>가 제시한 Q( $2\theta$ , q, b)함수와 Dwiggin의 Q( $2\theta$ , q, b,  $\mu t$ )함수<sup>11)</sup>를 이용하면 식(1)과 식(4)로부터 간단한 수식(5)가 유도된다. 식(5)를 이용하여 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비를 구한다.

$$\frac{I_m}{I_0} = \frac{B^2 Q(2\theta, q, b, \mu t)}{J(p) \sum_i A_i \mu_i(m)} \quad (5)$$

여기서 B=단위 포에 존재하는 각 원소의 총 전자 수의 제곱합, A $_i$ =각 원소의 원자량이고,  $\mu$ =평균 흡수 계수, t=시료의 두께,  $\mu_i(m)$ =각 원소의 질량 흡수 계수이다. 식(5)의 J(p)는 시료 내의 단위 포의 산란 강도로서

아래에 주어진 식(6)에 의하여 계산된다.

$$J(p) = \sum_i Z_i \left( q + \frac{1-q}{1+b\sin^2\theta} \right) \quad (6)$$

여기서  $b$ 와  $q$ 는 매개변수이고,  $Z_i$ 는 단위 포에 존재하는 각 원소의 원자번호이다.

### 3. 결과 및 고찰

식(6)에 있는 매개 변수  $b$ 와  $q$ 를 구하기 위하여 입사 빔의 각도에 따른 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 데이터가 요구된다. 따라서, 입사 빔의 파장과 산란 원소와의 어떤 특정한 조합에 대하여서도 적용할 수 있는  $k$ 의 함수로서 산란 인자의 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )을 계산하는 컴퓨터 프로그램밍을 작성하기 위하여 아래에 주어진 식(7)을 사용하였다.

$$f_i = f_i^0 + \Delta f_i + \Delta f_i' + \Delta f_i'' \quad (7)$$

여기서  $f_i^0$ =미교정 산란 인자,  $\Delta f_i$ =실수 분산 산란 인자,  $\Delta f_i'$ =허수 분산 산란 인자이다. 미교정 산란 인자( $f_i^0$ )의 값은 Cromer와 Waber<sup>12)</sup>가 self-consistent field relativistic Dirac-Slater wave functions을 사용하여  $k$ 의 함수로 계산한 곡선을 식(8)에서와 같이 fitting한 것을 사용하였다.

$$f_i^0 = \sum_{k=1}^n a_k \exp(-b_k k^2) + c \quad (8)$$

여기서  $a_n$ ,  $b$ , 및  $c$ 는 상수이며,  $n=4$ ,  $k=4\pi\sin\theta/\lambda$ 이다. B, O 및 Si 원소들의  $a$ ,  $b$ , 및  $c$ 의 값(Table 1)과,  $\Delta f_i$  및  $\Delta f_i''$ 의 값(Table 2)은 D. T. Cromer의 보문<sup>13)</sup>을 참고로 하였다. 일반적으로, 원소에 대한 산란 인자  $f_i$ 는 보통  $(\sin\theta/\lambda)$ 가 일정한 한 입사 빔의 파장에는 관계가 없다고 생각하지만, 입사 빔의 파장이 산란 원자의 흡수단 파장과 비슷하거나 클 경우 입사 빔의 진동과 산란에 의한 K꺽질 전자의 진동과의 공명 효과로 말미암아 변칙 분산(anomalous dispersion)이 일어난다. 따라서, 여러 종류의 X선 빔과 시료의 조합 조건에서 발생 가능한 변칙 분산의 오차를 제거하기 위하여 미교정 산란 인자( $f_i^0$ ) 대신에 교정 산란 인자( $f_i$ )를 사용하였다. CuK $_{\alpha}$ 빔( $\lambda=1.5418\text{\AA}$ ), MoK $_{\alpha}$ 빔( $\lambda=0.7107\text{\AA}$ ) 및 AgK $_{\alpha}$ 빔( $\lambda=$

$0.5608\text{\AA}$ )에 대하여, 본 연구자가 작성한 컴퓨터 프로그램을 이용하여 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에 적용한 결과, 입사 빔의 종류에 따른  $2\theta$ 의 함수로서 산란 인자의 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 곡선을 Fig. 1과 2에 나타내었다. Fig. 1과 2에서 각 곡선들이  $2\theta$ 값이 증가함에 따라 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 변화량이 같은 기울기로 감소하지 않는 경향은, 산란 인자( $f_i$ )의 값이 입사 빔의 종류에 따라 다르다는 것을 보여준다. 따라서, 변칙 분산에 대한 교정의 필요성을 보여준다. Fig. 2에서 MoK $_{\alpha}$ 빔을 사용할 경우의 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ ) 곡선과 AgK $_{\alpha}$ 빔을 사용할 경우의 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ ) 곡선이 겹치는 이유는 B와 O 원소의  $\Delta f_i$ 와  $\Delta f_i''$ 의 값이 동일하기 때문이다.

식(6)에 있는  $J(p)$ 곡선의  $b$ 와  $q$ 의 값은, Fig. 1(a)와 (b)에 주어진 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에 대한 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 곡선과 임의의  $b$ 와  $q$ 수치를 넣어 구한  $J(p)$ 곡선이 잘 일치할 때의 것을 선택하는 시행 착오법을 적용했다. 본 연구자가 작성한 컴퓨터 프로그램에 의해 구해지는 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 의 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )은 정합 산란 빔의 강도와 같다. 만약, 비정합 산란 빔의 강도가 포함된 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 곡선으로부터  $J(p)$ 곡선의  $b$ 와  $q$ 의 값을 구하기 위해서는 정합 산란 빔의 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )과 산술적으로 계산된 Compton 산란 강도의 합을 곡선을 이용하면 된다. 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에 대한 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 곡선과  $J(p)$ 곡선이 X선 회절 빔의 종류에 관계없이 모두  $q=0$  일 때 잘 일치하였는데, 이는 Warren의 결과<sup>9)</sup>와 잘 일치하였다. 그리고,  $q=0$ 을 선택한 후, 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에 대한 산란 인자 제곱합( $\Sigma f_i^2$ )의 곡선과  $J(p)$ 곡선의 최적의 일치하는 X선 회절 빔의 종류에 관계없이 시료 SiO $_2$ 의 경우에는  $b=45$ 에서, 시료 B $_2$ O $_3$ 의 경우에는

Table 2. Anomalous Dispersion Corrections.<sup>13)</sup>

		B	O	Si
$\Delta f_i'$	CuK $_{\alpha}$	0.0	0.0	0.23
	MoK $_{\alpha}$	0.0	0.0	0.09
	AgK $_{\alpha}$	0.0	0.0	0.06
$\Delta f_i''$	CuK $_{\alpha}$	0.1	0.1	0.36
	MoK $_{\alpha}$	0.0	0.0	0.09
	AgK $_{\alpha}$	0.0	0.0	0.06

Table 1. Coefficients for Nine Parameter Analytic Fit of Dirac-Scattering Factors.<sup>12)</sup>

	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$c$
B	2.0590	1.2844	1.0923	0.6868	20.8414	1.0090	63.3556	0.1707	-0.1260
O	2.8604	2.5212	1.5296	0.8135	12.7907	5.4279	0.3282	34.9406	0.274
Si	6.0755	3.2815	2.1670	1.3197	2.3497	29.1900	0.7060	84.8342	1.1533

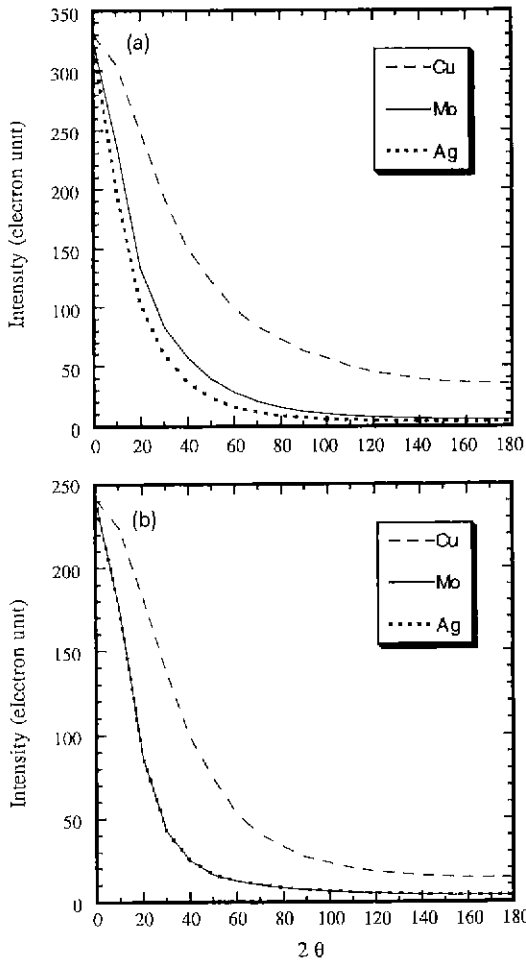


Fig. 1. (a) The curves of square of scattering factors for SiO<sub>2</sub> with various X-rays. (b) The curves of square of scattering factors for S<sub>2</sub>O<sub>3</sub> with various X-rays.

b=65에서 일어났다. 시료 SiO<sub>2</sub>와 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>에서 Q(2θ, q, b, μt)의 값을 각각 선택된 b와 q의 조건과 μt=1의 가정으로부터 Dwiggins의 논문<sup>10)</sup>에 주어진 표로부터 중간 삽입법으로 구하여, 2θ와 k의 함수로서 Table 3에 나타내었다. 임의의 2θ값으로부터 임의의 Q 값을 얻기 위하여 cubic spline interpolation법을 컴퓨터 프로그래밍에 도입하였다. Q 값이 정해지면 주어진 식(5)에 의하여 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비(I<sub>m</sub>/I<sub>s</sub>)는 구하여지고, 이 결과는 주어진 2θ의 범위에 따라 Fig. 2에 나타내었다. Fig. 2(a)는 2θ=0~180°의 범위에서 시료 SiO<sub>2</sub>의 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비로, CuK<sub>α</sub>빔의 경우에는 0.0010~0.0016, MoK<sub>α</sub>빔의 경우에는 0.0098~0.0587, AgK<sub>α</sub>빔의 경우에

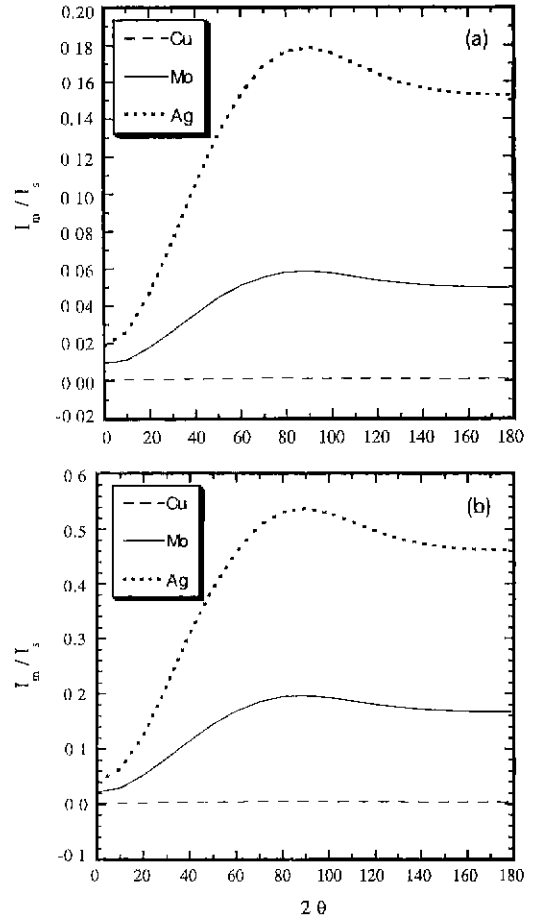


Fig. 2. (a) The multiple scattering curves of SiO<sub>2</sub> with various X-rays. (b) The multiple scattering curves of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> with various X-rays.

Table 3. The Values of Q(2θ, q, b, μt)×10<sup>4</sup> as a Function of 2θ and k.

2θ	k (CuK <sub>α</sub> )	k (MoK <sub>α</sub> )	k (AgK <sub>α</sub> )	Q in SiO <sub>2</sub>	Q in B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
0	0.00	0.00	0.00	67.1700	49.4784
30	2.11	4.59	5.80	45.7600	33.7075
60	4.08	8.86	11.20	28.5175	19.1200
90	5.76	12.53	15.84	17.1650	11.0350
120	7.06	15.34	19.41	10.6125	6.7175
150	7.87	17.11	21.64	8.0450	5.0625
179	8.15	17.72	22.41	7.4200	4.6575

는 0.0188~0.1786이다. Fig. 2(b)는 2θ=0~180°의 범위에서 시료 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>에 대한 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 비로, CuK<sub>α</sub>빔의 경우에는 0.0027~0.0054,

MoK $\alpha$ 빔의 경우에는 0.0230~0.1969, AgK $\alpha$ 빔의 경우에는 0.0396~0.5383이다.

앞의 결과에서 보듯이, X선 흡수 계수가 낮은 비정질 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 와 같은 비정질 고체의 정확한 구조 해석을 하기 위하여 CuK $\alpha$ 빔의 회절 강도 데이터를 사용할 경우, 시료 내에서 발생하는 다중 산란 강도의 크기가 무시할 정도로 작아서 다중 산란에 대하여 교정이 필요없다. 그러나, MoK $\alpha$ 빔 또는 AgK $\alpha$ 빔의 회절 강도 데이터를 사용할 경우, 시료 내에서 발생하는 다중 산란 강도의 크기가 충분히 크므로 다중 산란에 대하여 반드시 교정되어야 한다.

#### 4. 결 론

여러 종류의 X선 빔과 시료의 조합 조건에서 발생 가능한 변칙 분산의 오차를 제거하기 위하여 미교정 산란 인자( $f_0'$ ) 대신에 교정 산란 인자( $f_0$ )를 사용하였다. CuK $\alpha$ 빔을 사용하는 경우에는 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에서 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 크기는 무시할 정도로 작았지만, MoK $\alpha$ 빔을 사용하는 경우에는 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에서 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 크기는 0.98~5.87%와 2.30~19.69% 정도로 상당히 컸다. 또한, AgK $\alpha$ 빔을 사용하는 경우에는 시료 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 에서 단일 산란 빔에 대한 다중 산란 빔의 강도 크기는 1.88~17.86%와 3.96~53.83% 정도로 매우 컸다. 따라서, 반경 분포 함수 또는 쌍 함수 분포를 이용하여 X선 흡수 계수가 낮은 비정질 SiO $_2$ 와 B $_2$ O $_3$ 와 같은 비정질 고체의 정확한 구조 해석을 하기 위하여 MoK $\alpha$ 빔 또는 AgK $\alpha$ 빔의 회절 강도 데이터를 사용할 경우, MoK $\alpha$ 빔 또는 AgK $\alpha$ 빔의 측정 강도 데이터로부터 시료 내에서 발생하는 다중 산란 빔의 강도가 반드시 교정되어야 한다.

#### REFERENCES

1. M. Huffman and P. McMillan, "Infrared and Raman Studies of Chemically Vapor Deposited Amorphous Silica," *J. Non-Cryst. Solids*, **76**, 369-379 (1985).
2. P. McMillan B. Piriou and R. Couty, "A Raman Study of Pressure-Densified Vitreous Silica," *J. Chem. Phys.*, **81**(10), 4234-4236 (1984).
3. P. J. Bray, A. E. Geissberger, F. Bucholtz and I. A. Harris, "Glass Structure," *J. Non-Cryst. Solids*, **52**, 45-46 (1982).
4. B. E. Warren, "X-ray Determination of the Structure of Glass," *J. Am. Ceram. Soc.*, **17**, 249-254 (1934).
5. R. L. Mozzi and B. E. Warren, "The Structure of Vitreous Silica," *J. Appl. Cryst.*, **2**, 164-172 (1969).
6. R. N. Sinclair and A. C. Wright, "Neutron Scattering from Vitreous Silica," *J. Non-Cryst. Solids*, **57**, 447-464 (1983).
7. S. Chandrasekhar, "Radiation Transfer." Clarendon Press, Oxford, Chap. IX (1950).
8. S. L. Strong and R. Kaplow, "Diffuse Double Diffraction of X-Rays," *Acta Cryst.*, **23**, 38-44 (1967).
9. B. E. Warren and R. L. Mozzi, "Multiple Scattering of X-rays by Amorphous Samples," *Acta Cryst.*, **21**, 459-461 (1966).
10. T. T. Meek, "An Energy Dispersive X-ray Diffraction Study of Vitreous Silica," Ph.D. Dissertation, Ohio State Univ. (1977).
11. C. W. Dwiggin and D. A. Park, "Calculation of the Intensity of Secondary Scattering of X-ray by Non-Crystalline Materials," *Acta Cryst.*, **A27**, 264-272 (1971).
12. D. T. Cromer and J. T. Waber, "Scattering Factors Computed from Relativistic Dirac-Slater Wave Functions," *Acta Cryst.*, **18**, 104-109 (1965).
13. D. T. Cromer, "Anomalous Dispersion Corrections Computed from Self-Consistent Field Relativistic Dirac-Slater Wave Functions," *Acta Cryst.*, **18**, 17-23 (1965).