

# 根据中子散射计算非晶态物质径向分布函数的 N-RDF 程序<sup>1)</sup>

王俊桥 陈济舟

(天津理工学院材料研究中心)

崔 静

(天津计算中心)

单个地利用非晶物质对 X 射线、中子和电子的相干散射,可以计算其原子、电子或分子密度全径向分布函数 (RDF),也可以同时利用这三种射线的干涉函数求解偏径向分布函数 (P-RDF),以获得更精细的结构信息。

作者已报道了一个根据广角度 X 射线数据计算全径向分布函数的通用计算机程序<sup>[1]</sup> (此程序已修改移置到通用的 IBM-PC 微机上)。阚香兰等人<sup>[2]</sup>介绍了一个用 BASIC 语言编写的根据电子衍射数据计算非晶高聚物径向分布函数 (RDF) 的程序。本文简要介绍我们在 IBM-PC 微机上用 FORTRAN 语言(绘图程序用 BASIC 语言)编写的根据中子散射数据计算各类非晶态物质的径向分布函数 N-RDF 程序。

## 一、程序简述

描述非晶结构的全约化径向分布函数  $G(r)$  及全径向分布函数  $RDF(r)$ , 可通过下面给出的 (1), (2) 式从实验测定的干涉函数  $S(k)$  ( $k = 4\pi \sin \theta / \lambda$ ) 求得:

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} k [S(k) - 1] \sin(k \cdot r) dk, \quad (1)$$

$$RDF(r) = 4\pi r^2 \rho_a + rG(r), \quad (2)$$

$\rho_a$  为平均原子数密度。对于慢中子散射来说,  $S(k) = \frac{1}{b} \frac{d\sigma}{d\Omega}$ , 其中  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  是核的微分散射截面,  $b$  是对元素的同位素和自旋状态取平均后的中子相干散射长度(振幅)。 $b$  可由实验测定或从文献数据中找到,  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  则可由实验测定的中子散射强度通过 N-RDF 程序计算得到。

N-RDF 程序由主程序和强度规格化、校正、归一化、截断误差修正和剩余误差修正等五

个子程序以及绘图程序所组成。以  $2\theta$  为间隔, 在不同测量条件得到的样品散射强度, 在规格化子程序中进行统一、插值、平滑和坐标度换 ( $2\theta \rightarrow k$ ), 得到相同测量条件和便于后面数据处理的强度数据。这种规格化强度数据在校正子程序中进行背景、吸收和几何因子等校正, 得到比例于总的微分散射截面的校正强度  $I_c(k)$ 。通过归一化子程序计算并优化(最小二乘方法)归一化因子  $C$ 。由  $C$  和  $I_c(k)$  通过下列各步得到干涉函数  $S(k)$ 。总微分散射截面

$$\frac{d\sigma_{tot}}{d\Omega} = c I_c(k). \quad (3)$$

相干微分散射截面

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{tot}}{d\Omega} \left( \frac{d\sigma_{inc}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{lan}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{mpa}}{d\Omega} \right), \quad (4)$$

式中  $\frac{d\sigma_{inc}}{d\Omega}$ ,  $\frac{d\sigma_{lan}}{d\Omega}$ ,  $\frac{d\sigma_{mpa}}{d\Omega}$  分别为非相干散射截面, 劳厄散射截面和多重散射截面。它们都可以根据原子(核)的相干和非相干散射长度, 总散射和总吸收截面等有关参数计算出来<sup>[3]</sup>。再经过非弹性散射校正 ( $f_p$ ) 后, 就可得到干涉函数

$$S(k)^{-1} = \left( \frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} - \langle b^2 \rangle \right) / \left( \langle b \rangle^2 - f_p(k) \right), \quad (5)$$

式中  $\langle b^2 \rangle = \sum_i X_i b_i^2$ ,  $\langle b \rangle = \sum_i X_i b_i$  ( $X_i, b_i$  分别为  $i$  类原子的分数和散射长度)。

采用快速傅里叶变换 (FFT) 方法, 就可以从干涉函数计算出分布函数。分布函数上的归一化因子、截断误差和缓变误差等采用与 X 射线散射法类似的方法<sup>[4]</sup> 处理。

## 二、应用实例

### 1. 金属玻璃 TiCu

1) 本工作获国家自然科学基金资助。

用本程序根据 TiCu 中子散射数据计算的全径向分布函数如图 1 所示。它与 X 射线散射得到的分布函数比较<sup>[5]</sup>有两个特点：(1) 第二主峰高度大于第一主峰高度。这和由 X 射线散射得到的金属玻璃的分布函数的普通特点相反。(2) 在约 3 Å 附近出现负峰。前者可解释为在 TiCu 中存在显著的化学有序性；后者是因为它对中子散射中，Ti, Cu 原子的散射长度具有相反符号 ( $b_{Ti} = -0.34 \times 10^{-12} \text{cm}$ ,  $b_{Cu} = 0.76 \times 10^{-12} \text{cm}$ )。因此，利用 TiCu 对两种散射得到的分布函数差别，可进行精细的结构测定。

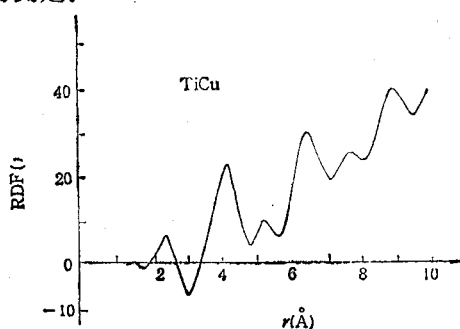


图 1 TiCu 玻璃的全径向分布函数  $RDF(r)$

## 2. 非晶硅及其氢化物

利用文献[6]上的 a-Si 及 a-SiD (14% 氘) 的中子散射强度,用本程序计算了相应的  $G(r)$  分布曲线。a-Si 的径向分布函数所对应的峰位置和配位数与由 X 射线和电子衍射得到的是是一致的<sup>[7]</sup>。图 2 所示的 a-SiD 的径向分布函数  $r = 1.45 \text{ Å}$  处出现了一个 a-Si 没有的附加峰,这是对应于 Si-H 的共价键间距。非晶硅氢化物的这个间距用 X 射线和电子衍射法是观察不到的,这是中子衍射法的优点。

未氘化的非晶硅氢化物,由于严重的氢的非相干散射,使径向分布函数计算难以进行。作者利用两种不同含氢量样品的中子散射强度之差比例于含氢量的假设,可以大大减少非相干散射的影响,并获得了不经过氘化直接由含氢样品得到类似图 2 的  $\text{SiH}_{0.14}$  径向分布函数。在该分布曲线上不仅反映出 Si-H 键( $\sim 1.5 \text{ Å}$ ),而且相应于 a-Si 的第一峰 ( $2.4 \text{ Å}$ ) 分裂成双峰(其中  $r = 2.56 \text{ Å}$ ),可能表示 H-H 键和  $>\text{Si}=\text{Si}<$  键。

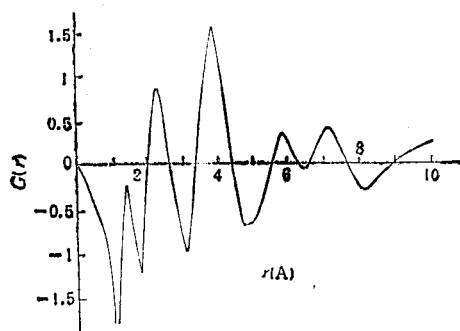


图 2 a-SiD 的约化径向分布函数  $G(r)$

本工作采用的中子散射数据是由中国原子能科学院杨继廉、张百生和南开大学黄杰生提供的。他们和南开大学汪根时教授对本工作给予了大力支持和帮助,谨致谢意。

- [1] 陈济舟、王俊桥、叶绪莘,计算机与应用,5-1(1988),31.
- [2] 阙香兰等,计算机与应用化学,5-3(1988),196.
- [3] G. E. Bacon, Neutron Diffraction, 3rd ed., Clarendon Press, Oxford, (1975).
- [4] 陈济舟等,分析测试通报,6-5(1987),56.
- [5] 陈济舟、王俊桥、叶绪莘,金属学报,24-3(1988),B201.
- [6] T. A. Postol et al., Phys. Rev. Letters, 45 (1980), 648.
- [7] S. C. Moss and T. F. Graczyk, Phys. Rev. Letters, 23(1969), 1167.

(上接第 300 页)

微通道板放大这些光电子,借助于磷光体再将光电子转换成光子。这种器件用纤维光束与光二极管阵列连接,可“放大”信号近 3—4 个数量级。为测快速瞬态信号,在增强器上可以加一控制门电路,可测信号高达 5—10nm。

- [1] W. O. 亨利著,铁道部北京 27 通信工厂科学研究所翻译组译,电子系统噪声抑制技术,人民铁道出版社,(1978).
- [2] Hugh Doherty, Laser Appl., 2-7(1983), 41—45.
- [3] 陈一询,百科知识, No. 11(1985), 59—61.