

黄散射——杂质或缺陷引起的漫散射

朱 邦 芬

(中国科学院半导体研究所)

X射线与物质相遇时,会被物质原子的电子所散射。它在物质结构分析方面有着非常广泛的应用。对于完整晶体,如果入射与散射的X射线波矢差等于晶体倒格矢,则会出现布拉格峰,峰高与样品的体积平方成正比,而峰宽则反比于晶体尺寸。对于大块样品来说,布拉格峰非常尖锐。

然而,实际材料往往偏离严格的周期排列。其原因可以是晶格原子的热运动,它在布拉格峰附近产生附加的散射强度,被称为热漫散射;另一种可能的漫散射的机制是由材料中外来杂质与缺陷引起的,它是由黄昆先生首先提出并在理论上作出分析。

1947年,在莫特教授建议下,黄先生定量地研究了稀固溶体的X射线散射,估算了体积不同的外来原子所引起的长程晶格畸变对X射线衍射的影响,推导了这种静态畸变造成的漫辐射强度公式,从而开创了X射线衍射研究中的一个新的分支领域,产生了深远的影响^[1]。这种集中在布拉格峰附近由点缺陷长程弹性位移场产生的X射线漫散射,目前在文献中被命名为黄(昆)漫散射(英文缩写HDS),或简称黄散射^[2]。

黄昆先生在研究稀固溶体X光漫散射时,提出了一个简化的模型,其主要内容如下:

(1) 无序分布在稀固溶体中的杂质原子被看作是一个个孤立的畸变中心,即每个中心的贡献线性迭加后形成晶格位移场。

(2) 杂质原子与晶格原子的体积不同,然而对X射线的散射假设是相同的。

(3) 畸变中心造成的弹性位移是各向同性的,与距离平方成反比。

经过复杂的推导和取平均以后,黄先生得

到长程弹性畸变导致的X射线漫散射的主要特点如下:

(1) 杂质原子的存在使布拉格衍射峰强度减了一个正比于倒格矢平方且与杂质浓度有关的因子。

(2) 在布拉格峰附近,漫散射有一定的强度分布。在垂直倒格矢方向上,漫散射为零;在平行倒格矢方向上,黄散射强度随偏离布拉格角而迅速下降。

(3) 黄漫散射与热漫散射在形式上比较相似,但微观机制及定量规律很不一样。在常温下,点缺陷畸变场导致的黄散射往往被热效应掩盖。

黄昆先生上述预言由于受当时实验技术的限制,直到1967年,Peisl等在研究 γ 射线辐照LiF晶体X射线漫散射实验时,才观察到了点缺陷长程位移场所引起的黄散射^[3]。Peisl等的实验证实了黄漫散射强度上述分布规律。此后,在快中子辐照铜晶体和电子辐照铝晶体等材料中,国外科学工作者都观察到了黄散射,从而为黄散射被国际学术界普遍承认奠定了基础。

1972年,联邦德国物理学家Trinkaus^[4]推导了典型点缺陷(如间隙原子、空位等)的黄散射表达式。在各向同性条件下,黄散射在倒易空间中的分布是切于倒格点的两个球面簇,通常称作黄(昆)球。Trinkaus和Dederichs对各种类型的各向异性的位移场引起的漫散射作了平均处理。他们的分析表明,利用黄散射零强度面(线)与等强度面(线)的位置、形状等特征,可以倒推出点缺陷的结构(如点缺陷种类、对称性、缺陷大小,等等)。这样,在倒易空间测

(下转第523页)