

X射线跟我们眼睛感觉到的可见光一样都是电磁波,但X射线的波长要小得多。我们常说的X射线的波长在0.1埃至10埃之间,而物质的原子或分子的空间排列也在这个尺度范围中。每个原子或分子是一个对波的散射体,根据波的衍射原理,如果物质的原子或分子的空间排列有一定的周期性,则X射线会在物质中产生衍射现象。如果我们收集衍射信号并加予分析,就可以揭示晶体内的原子和分子的空间排列状况。X射线衍射技术正是这样一门科学技术,它在物理学、材料科学、化学、生物学等众多的领域中有着广泛的应用。

通常X射线是由X光管产生的。同步辐射装置是一种能连续发出高亮度、宽谱带的电磁辐射的设施。它的建立和发展,使X射线科学和技术跨上了一个新的台阶。它具有很多常规X光机的X射线所没有的性能:具有高亮度(为X光机的X射线特征谱 $10^4$ 倍以上)、连续的宽频带光谱(从10meV到100keV)、高准直性(发散度小于毫弧度),还具有脉冲时间结构(例如每 $10^{-7}$ 秒出现一个 $10^{-10}$ 秒宽的脉冲)、偏振性好(接近100%)等特点。这些优异性能为X射线衍射技术扩展了应用领域,我们在这篇短文中介绍其中的四个方面,它们都是用常规X射线谱所不能实现的。

### 1. 表面X射线衍射技术

物质的表面性质(包括固体的和液体的表面)历来是科学研究中一个重大课题。物质表面与很多物理和化学过程有关,如半导体物理的金属-半导体结的形成机理。表面原子的排列即表面原子结构则是用来阐述表面物理和化学现象的一个重要的依据。为研究表面原子结构,所用的实验手段必须能够获得材料表面的信号,并能将它们与材料体内的信号区分开来,表面X射线衍射(surface X-ray diffraction(简称SXRD)就是这些实验手段中的一种。SXRD的最基本的优点在于X射线与物质的相互作用较弱,从而用相对简单的X射线运动学理论就可以精确地反映客观规律。而常用于表面结构分析的低能电子衍射方法,由于电子与物质的相互作用很强,用它很难进行定量的表面结构分析。SXRD另一特点是它能在大气下实现,而不象其它的表面实验方法如扫描隧道显微镜那样必须在超高真空中才能工作,因而用它能测量暴露在大气或其它气体的固体及液体表

面结构。

图1是表面X射线衍射实验的原理示意图。一束X射线以 $\alpha_i$ 角入射到表面上,如果某一表面原子阵列符合Bragg条件,即 $2d\sin\theta = \lambda$ ,就发生衍射,这里, $d$ 是原子阵列的周期, $\theta$ 是衍射角, $\lambda$ 是X射线波长。衍射束以 $\alpha_f$ 角离开表面, $\alpha_i$ 和 $\alpha_f$ 一般为 $0.5^\circ$ 左右,也就是在材料的全反射临界角附近。实验上改变样品相对入射束的波矢量 $k_i$ 的位置和探测器的位置,探测样品表面衍射谱。为此,有三种实验方式。第一种称为径向扫描,它是改变 $\theta$ 并使 $\theta-2\theta$ 联动,即使 $k_i$ 和 $k_f$ 永远保持与散射矢量 $q$ 成镜面关系,这时 $q$ 的方向保持不变而数值改变。这种方法能反映样品表面沿某些方向的周期性,衍射峰的宽度与产生衍射的区域的尺寸成反比。第二种称为摇摆曲线扫描,保持 $\theta$ 不变,改变 $2\theta$ (即探测器)并使 $q$ 的数值不变而方向变化。这种方法能测量表面原子列的平行性或表面的完整性。衍射峰越宽,表明表面完整性越差。第三种称为掠入射角扫描,使 $\alpha_i$ 在样品的全反射临界角附近变动,同时保持 $q$ 的方向和数值都不变,探测器沿 $\alpha_f$ 扫描。这种方法可测量表面层的厚度。原则上,在 $i, \alpha_f$ 和 $\theta$ 能精确地作独立运动的装置上都可以作SXRD。现在,有些SXRD装置配备有分子束外延、俄歇电子谱仪等设备,形成一个多功能的表面实验装置。根据研究目标单独选择某一个方法或同时选择三个方法,收集实验数据,设想表面原子结构模型,根据表面X射线衍射理论(X射线运动学理论即可)进行计算并与实验结果比较,就可以得出样品表面的原子结构。在理论分析方面,采用我们熟悉的X射线衍射运动学理论就可以精确地描述SXRD的衍射谱。建立表面衍射理论的思路是将X射线衍射运动学理论应用到二维空间上,并考虑X射线在临界角附近的表现(如全反射),推导出关于表面结构的衍射谱的理论表达式。表面衍射理论有一些特点:三维倒易空间的点变成二维倒易空间的倒易杆,这些倒易杆垂直于表面;描述表面晶体结构的密勒指数既有分数的指数也有整数的指数,前者的衍射峰给出了表面重构后的信息,后者的衍射峰给出了表面 $1 \times 1$ 周期的信息,后者还给出了表面的粗糙程度和表面缺陷情况。

与内部的原子数相比,表面上的原子数要小得多,一般为每平方厘米 $10^{11}$ 个。作



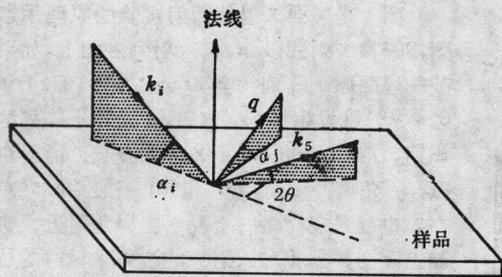


图1 表面X射线衍射原理示意图

SXRD 时 X 射线的照射面积约为  $0.5\text{cm}^2$ ，那么参与衍射的原子为  $5 \times 10^{14}$  个。在三维空间上，这些原子包含在  $10^{-9}\text{cm}^3$  这样小的体积中，这样少的原子参与衍射必然对光源的亮度有一定的要求。那么需要多少光子才能作表面 X 射线衍射呢？我们要测量 Ge(111) 表面层的衍射峰，要求计数率为 100 个光子/秒。若样品表面参与衍射的面积为  $5\text{mm}^2$ ，X 射线的波长为  $1.3\text{\AA}$ ，样品到探测器的距离为  $700\text{mm}$ ，探测器在衍射平面的法线方向的高度为  $20\text{mm}$ ，认为偏振因子和 Lorentz 因子都等于 1，可得入射 X 光的通量必须为  $10^9$  个光子/ $\text{mm}^2\cdot\text{s}$ 。这个值相当于同步辐射装置的弯铁产生的在 X 射线波段的辐射通量。而常规的 X 光机的辐射通量比这个值低二至三个数量级，因而只能用于高原子序数的材料例如金的表面衍射研究。现代的同步辐射装置都建有插入件如波荡器和扭摆器，它们产生的辐射的亮度比弯铁产生的辐射的亮度高两个数量

量有好的信噪比。事实上，在已发表的 SXRD 工作中，只有很小的部分在常规 X 光机中进行。

SXRD 可以测量表面单层原子的结构，也可以测量多层原子的结构。SXRD 已经应用到半导体表面和界面、金属表面和界面、金属-半导体界面等研究领域。比起其他的表面分析手段，同步辐射 SXRD 的应用可归纳为三个特点：(1) 无序表面的研究：由于同步辐射 SXRD 有很高的  $q$  值 ( $q = 2 \sin \theta / \lambda$ )，因此它能例如对 Au(110) 精确地揭示表面重构或覆盖层重构时发生的无序性， $1 \times 2$  和 Ge(111)c( $2 \times 8$ ) 的研究；(2) 物质表面熔化的研究：对 Pb(110) 和 Ge(111)-Pb 的表面液体层的 SXRD 研究表明，SXRD 用在表面熔化的研究是可行的；(3) 界面的研究：由于 X 射线能容易穿过覆盖层，所以 SXRD 能很好的用在对覆盖层与衬底的界面的研究中，一个例子是电池的 Pb/Ag(111) 的界面结构的研究。

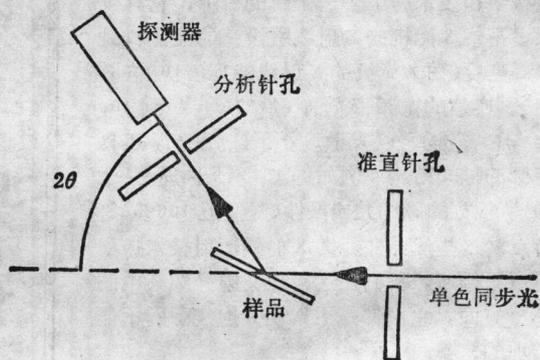


图3 相干 X 射线衍射实验示意图

## 2. 相干 X 射线衍射技术

同步辐射相干 X 射线衍射 (coherent x-ray diffraction, 简称 CXRD) 是最近 (1991 年) 提出来并正在发展的一种实验技术。它在研究物质从纳米到微米尺度的微结构方面是一种有前途的方法。它能够实时地反映物质微结构的动态演变过程，因而它又称为 X 射线强度涨落显微术。

同步辐射相干 X 射线衍射技术是受激光散斑理论启发而产生的。根据这个理论，若要分辨出空间两个物点的散斑，对光的性质有一定的要求：(1) 从样品不同部分出来的散射光的光程差必须比入射光的纵向相干长度  $L_z$  大很多，这里

$L_z = \lambda^2 / 2\delta\lambda$ ，式中  $\lambda$  是光的波长， $\delta\lambda$  是波长分布。这实际上是 CXRD 对微结构的分辨率；(2) 入射光的束斑尺寸不能比光束的横向相干长度  $L_x$  大很多，

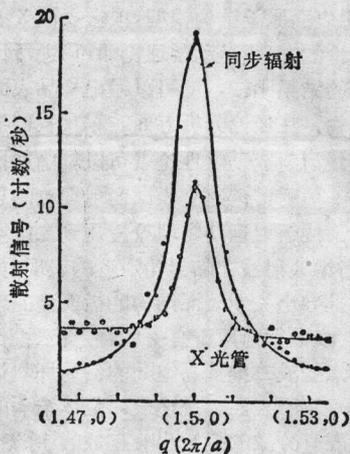


图2 60 千瓦转靶 X 光机和同步辐射作的 Ge(100) $2 \times 1$  表面(3/2,0)衍射谱

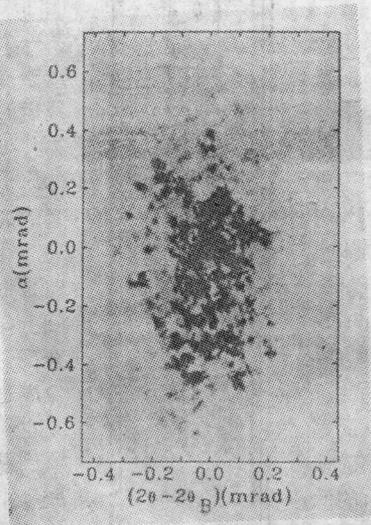


图4  $\text{Cu}_3\text{Au}$  反相畴的相干 X 射线衍射花样，衍射面为(001)

量级以上，所以同步辐射很适宜作 SXRD。图 2 是 60 千瓦转靶 X 光机和同步辐射作 Ge(100) $2 \times 1$  表面的 (3/2,0) 反射的结果的比较，显然，同步辐射 SXRD 具

此处  $L_s = \lambda R_s / 2d_s$ , 式中  $R_s$  是光源到样品的距离,  $d_s$  是光源束斑的大小。那么对于同步辐射怎样才能满足这两个条件呢。为满足条件(1), 用单色器可以使从光源出来的连续波长的同步辐射变成波长范围  $\delta\lambda$  很窄的单波长辐射。较常用的单色器由两块 Si (111) 单晶组成, 设  $\lambda$  是辐射的波长,  $\delta\lambda$  是经过单色器后的辐射的波长范围, 对于  $\lambda = 0.15\text{nm}$  则可得  $\delta\lambda/\lambda = 1.4 \times 10^{-4}$ , 因而  $L_s \sim 0.5\mu\text{m}$ 。用高亮度的同步辐射光源和更高分辨率的单色器, 这个值可以进一步减小。对于条件(2), 我们可以作一估算, 对于尺度为  $0.3\text{mm}$  的光源, 设样品到光源的距离为  $30\text{m}$ , 可得  $L_s \sim 7\mu\text{m}$ 。为满足条件(2), 用针孔可以限制入射到样品上束斑的大小。用激光打孔方法, 可使针孔尺寸达  $2.5\mu\text{m}$ 。图 3 是 CXRD 的实验设备配置示意图。由于受针孔的限制, 进入到样品的辐射强度很小, 设同步辐射光源的亮度为  $10^{15}$  光子/秒·毫弧度<sup>2</sup>·毫米<sup>2</sup>·0.1% 谱带宽, 采用  $5\mu\text{m}$  的准直针孔, 在样品上每秒钟可得到  $3 \times 10^5$  个光子, 这个强度能满足用 CXRD 跟踪微结构的演变的要求。但是, 常规的 X 光管发出的 X 射线亮度比现代的同步光源的亮度小三个数量级以上, 故只有在同步光源上才能实现动态的 CXRD 实验。

这里以 CXRD 研究  $\text{Cu}_3\text{Au}$  合金反相畴为例来说明 CXRD 的应用。 $\text{Cu}_3\text{Au}$  合金的微结构由一些无规排列的结构单元所组成, 它们之间的相位关系为  $180^\circ$  的整数倍, 故被称为反相畴。反相畴随温度而变化, 研究这个变化无论在科学上还是在应用上都是很有意义的课题。图 4 是用电荷耦合器件 (CCD) 探测器记录的  $\text{Cu}_3\text{Au}$  合金反相畴的 (001) 的衍射花样, 通

过一套类似于激光散斑理论中的数据处理方法, 将这个衍射花样转变为反相畴的空间分布。如果记录样品在不同温度的衍射花样, 就可以得出反相畴随着温度的变化, 在空间的分布的演变。这套变换理论还在探讨之中。

同步辐射 CXRD 技术显示了很大的应用潜力。例如, 它可以用于测量在  $1-100\text{nm}$  尺度下的固体或流体中的物质传输机制, 也可以用来测量平衡态动力学的临界现象和非平衡畴粗化的涨落现象, 它还可以用来研究诸如电荷密度波体系和准晶物质等具有非公度结构调制的物质的相位子 (phason) 动力学。(待续)

## 本刊明年举办高级科技 英语写作培训班

随着近年来国际学术交流的不断开展, 我国用英文撰写科技书籍及论文者日益增多, 提高写作水平已成为亟待解决的问题。本刊愿为此作点贡献, 特主办《高级科技英语写作培训班》对象为已具备中级科技英语水平的研究人员, 工程技术人员、编辑及研究生等。讲课的目的旨在将学员写作水平提高到较高的层次, 讲课内容包括科技英语写作的明白性、简洁性、连贯性、流畅性、语态、缩略词、标点符号等, 还包括论文题目及摘要的写作手法 (不讲授基础英语语法及句法)。对考试合格的学员颁发结业证书。培训班为期一周, 日期(待定), 地点: 北京玉泉路中科院高能物理所, 学费 200 元, 食宿自理。需参加者请来函联系。

(鹏水)

## 1993 年全国《现代物理学与应用技术》学术研讨会通知

为了适应当前深化改革的新形势, 落实邓小平同志“科学技术是第一生产力”和南巡讲话精神, 加快四个现代化的进程, 《现代物理知识》编辑部、武钢物理学会和武钢职工大学拟于 1993 年 5 月初在武汉市联合主办《现代物理学与应用技术》学术研讨会, 欢迎各企业、厂矿、研究所、学校及有关单位参加。

一、会议内容 现代物理学与工程技术; 现代物理学与冶金工业; 现代物理学与边缘学科; 物理教学与经济建设等。

二、征文内容 每篇论文包括题目、作者姓名、单位名称、邮政编码; 文章不得超过 3000 字, 需用稿纸抄写, 字迹清楚, 符号规范。论文经《现代物理知识》编辑部审查合格者, 发给参加会议正式通知; 经大会学术评审委员会评审通过的论文, 由大会发给论文证书, 并选登在 1993 年《现代物理知识》(增刊) 之上。

三、会议活动 安排北京正负电子对撞机国家实

验室、同步辐射国家实验室、《现代物理知识》编辑部和武汉钢铁公司等单位专家作专题报告; 大会分若干专题进行学术交流, 评选优秀论文; 考察武钢及武汉工业设施, 参观古建筑; 举行座谈会; 放映高科技录像等。

### 四、有关事项

(1) 请将回执于 1993 年 1 月底前寄至武汉武钢大学学报编辑部赵国求、栗晓同志收, 邮政编码: 430080; 电话: (027) 696127。同时预交住房金 20 元。

(2) 凡会议代表每人均收注册费 100 元, 资料出版费 150 元。

(3) 提交论文者, 请将论文及审稿费 (每篇 10 元) 于 1993 年 2 月底前寄至北京 318 信箱《现代物理知识》编辑部秋浦收, 邮政编码: 100039; 电话: 8213344-782。

《现代物理知识》编辑部、武钢物理学会、武钢职工大 (注: 需回执者, 请向主办单位索取)