

黄昆 X 射线漫散射
蒋四南

编者按:

本篇是由国家自然科学基金研究项目《黄昆 X 射线漫散射实验研究》负责人蒋四南先生应本刊特约所撰写。中科院鉴定委员会认为:该项实验装置的物理设计是正确的,实验仪器布置是合理的,改装后的仪器装置达到了设计精度,在 77K 进行黄昆 X 射线漫散射测量数据是可靠的。根据黄昆散射强度的差异,初步阐明了不同注入元素在晶格中的占位状态。这一实验结果已进入国际研究的前沿。

X 射线漫散射几乎同 X 射线衍射现象同时开始研究。1912 年, Laue 发现了晶体对 X 射线有衍射现象。1913 年, 由于背底的存在, Debye 便发现了热漫散射; 1922 年, Compton 在理论上预言, 1926 年, 我国留美科学家吴有训便在实验上证实; 当 X 射线同晶体相互作用后, 出现非弹性散射, 即

Compton—吴有训漫散射; 以后对有序合金的研究中, 又观测到超晶格谱线的消失所出现的漫散射。

1947 年, 我国著名物理学家黄昆在英国 Bristol 大学师从 Mott 教授, 时年 28 岁的黄昆以极其敏锐的目光, 欣然接受了 Mott 交给的一道理论计算题“稀固溶液中的 X 射线散射”。为了解决这一问题, 便于计算, 他设想的物理模型:

1. 固溶原子在晶体中呈杂乱分布, 不存在超晶格衍射谱线;
2. 固溶原子在晶格中的存在, 要引起晶格原子的微小位移。在距固溶原足够远的地方, 晶格原子的位移量服从 Fock 定律;
3. 各固溶原子对晶格点原子位移的相互影响可以忽略。

黄昆在自己设计的物理模型的基础上, 进行了严密的数学推算, 得出了三个与 X 射线散射强度有关的结论:

1. 晶格原子位移, 将使 Bragg 峰变弱, 并在 Bragg 峰附近出现不可忽视的漫散射;
2. 该漫散射同热漫散射混杂在一起, 在常温下, 比

热漫散射还弱;

3. 该漫散射强度, 在倒易空间中, 同 Bragg 峰的距离的平方成反比。

尽管黄昆预言的这三个重要结论来自合理的物理模型, 但由于散射强度实在太弱, 以致于在当时的实验技术条件下, 实在无法证实。这导致了黄昆漫散射理论束之高阁达 20 年之久。直到 1967 年, 德国物理学家 Peisl 在研究 γ 射线辐照氟化锂晶体时, 在 Bragg 峰附近, 观测到了一种不同于大家所熟悉的漫散射, 其漫散射强度同距 Bragg 峰的倒空间距离的平方成反比。他的结果一公布, 立即引起世界物理学界的关注, 认为是 γ 射线辐照氟化锂晶体时造成的点缺陷有关。同黄昆 1947 年所预言的结论吻合。时隔整整 20 年, 黄昆漫散射理论终于在实验上得到了证实。虽然在这之前, 在某些很漂亮的实验中, 已观测到了在 Bragg 峰附近的漫散射, 但在分析实验时, 没有同黄昆指出的漫散射强度关系联系起来, 不能成为黄昆理论的首先证实实验。

黄昆理论被证实后, 吸引了世界众多的科学家从理论和实验两个方面研究点阵位移引起的 X 射线漫散射。1971 年, 美国橡树岭国家实验室的 Dederrichs 在理论上研究了点缺陷集团引起的漫散射, 并计算了散射区的等强度分布曲线。1972 年, 德国达姆斯特丹高校理论物理研究所的 Trinkaus 发表了两篇理论性文章, 详尽地研究了点缺陷的偶极力张量及位错环引起的漫散射强度分布, 明确给出了黄昆散射强度同偶极力张量的数学关系式, 发展了黄昆理论。1973 年, 德国 Ehrhart 和 Schiling 详尽地研究了电子辐照铝晶体的漫散射。1974 年在德国于里西召开了一个国际会议, 主要内容是晶格点阵位移引起的 X 射线漫散射。在会上统称这类型的漫散射叫黄昆 X 射线漫散射 (X-Ray Huang Diffuse Scattering—HDS), 将 X 射线的漫射区域亦叫黄昆区域, 从而确立了黄昆散射的国际地位。1986 年, 英国 Gillan 又推导出离子晶体中电极化也要引起类似的漫散射, 亦叫黄昆散射。所以现在广义的黄昆散射, 既包括了晶体中点阵原子的静位移, 也包括晶体中电荷的静位移。

利用黄昆散射可以研究固体物理中诸多物理参量: 如确定偶极力张量; 测定点缺陷浓度, 鉴别缺陷类型; 判别原子的占位状态等的一个强有力的工具, 而且归并了种种类型缺陷引起的漫散射, 简化了研究。自此之后, 在固体中由于各种物理机制所引起的 X 射线漫散射可以归纳为四种类型:

1. 由晶格原子振动引起的热漫散射 (TDS)
2. 由于原子中的电子吸收引起的 Compton 漫散射 (CDS)
3. 由结构的有序度引起超晶格谱线的漫散射;
4. 各种类型缺陷引起晶格原子位移或电荷位移产

生的黄昆漫散射。

在这四种漫散射中,黄昆散射内容最丰富,同固体物理的性质联系得最紧密,从而其实用价值也更大。遗憾的是,黄昆散射在四种漫散射中强度最弱,且靠近 Bragg 峰,从而给实验造成的困难也最大。其困难主要是:

1. 要尽可能提高 X 射线入射光的强度,以提高黄昆散射强度;

2. 要尽可能降低热漫散射的影响,即降样品的测量温度。而对样品冷却首先要解决 X 射线的入射与出射问题。问题的原理简单,但在技术上实现却有一定的难度;

3. 黄昆散射靠近 Bragg 峰,要测量出黄昆散射,测角仪的分辨率要求较高,特别是在半导体材料中更为突出;

4. 由于黄昆散射很弱,必须利用时间累计的方法实现定点测量,为了便于比较,最后还要按单位时间对强度平均;

5. 不能利用底片记录散射强度,而要用高灵敏度探测器及低噪音的电子学系统;

6. 为了测量黄昆散射不同方向上的强度差异,样品和探测器在真实空间中的位置状态必须转换成在倒易空间中的位置状态,探测器和样品的运动规律较为复杂,每一次运动都必须经过计算。

所以要实现黄昆散射的实验测量没有现代的电子学和计算机技术是不可能的。这也就是为什么黄昆散射研究还只局限于少数几个国家的原因。

黄昆是我国著名的物理学家,它的理论在我国实现实验测量,不但是研究固体物理的需要,而且更具有特殊意义。在国家自然科学基金委的支助下,由中国科学院半导体研究所蒋四南副研究员负责的“黄昆 X 射线漫散射实验研究”的研究课题就是为了在中国实现黄昆散射测量。该研究小组利用原有的仪器设备,在充分估计了各种困难因素之后,为了实现黄昆散射测量,采用计算机控制仪器运动、用计算机收集、处理实验数据。为此,对原有的仪器进行了改装,并重新布置光路。将原精度为 0.01° 由伺服马达驱动的测角仪改造为由步进马达驱动,单向转动精度为 0.0025° 。添置一台 PC-XT 微计算机,存储量扩展为 640K。为解决计算机与外部仪器的联接,设计了一个接口线路板,编写一套适于黄昆散射测量需要的软件系统,用以指令仪器运动、采集黄昆散射强度数据,并将数据从真实空间位置转换为倒易空间位置,作黄昆散射强度与倒空间位置的关系曲线,存贮并由电视屏幕或打印机输出。在国外,为了提高 X 光强度,一般采用大功率 X 射线发生器,再加上弯晶单色器,可以提高强度 1—2 个数量级,但这种方法, X 射线的发散度比较大,降低了分辨率,对研究金属晶体,由于黄昆散射区域较大,

牺牲分辨率以求得高强度是合算的。但对高完整性的半导体晶体, Bragg 峰的角度很窄,黄昆散射区亦较小,要求分辨率较高,在光路上拟采用以提高分辨率为主的实验布局。X 射线源利用细焦点以提高单位面积光强。利用 $\text{CuK}\alpha_1$ 靶头,采用 $\text{Si}(422)$ 衍射面的平板单色器获得具有偏振性能的 X 射线单色光。样品与单色器采用平晶(+,-)配置以消除色散,提高了分辨率。在我们的实验装置中,为了节省开支,避免利用昂贵的液氮,采用了廉价的液氮,使黄昆散射与热漫散射的比值在室温提高了约 4 倍。利用这一套在 77K 条件下测量装置,实现了黄昆散射的测量,测出了 GaAs 单晶的(400)衍射在[100]方向和[011]方向具有不同的黄昆散射强度。同理论预言的趋势一致。对 GaAs 未注入样品,离子注入 $\text{Mo } 10^{15}$ 的 GaAs 和离子注入 $\text{Er } 10^{15}$ 的 GaAs 三种样品进行了黄昆散射的实验研究。根据黄昆散射强度的差异,初步阐明了不同注入元素在晶格中的占位状态。这一实验结果在国际上至今尚未见过报道,从而使我国的黄昆散射研究进入了国际研究的前沿。这一研究成果已于 1991 年 5 月 7 日在中科院半导体所通过院级鉴定。

黄昆散射实验研究在我国还刚开始,还有大量的工作需要我们去。特别是半导体材料和激光材料等电子学科方面的材料,由于其本身的完整性较高,缺陷较少,黄昆散射实验的困难更大。另一方面,在电子材料中,杂质、缺陷对其光电性能的影响也较大,所以黄昆散射实验研究的应用价值及社会效应也更明显,随着其研究内容扩大和深入,必将对我国的科技进步起促进作用。

敬告读者

本刊连续三年,未曾涨价,为啥明年每册定价 1.30 元?其一,出版费、稿费上调;其二,原来定价偏低,造成连年亏损;其三,本刊适应广大读者的要求,扩大版面,由原来的 32 页增至 48 页。说明了原因,想必能取得各位朋友的谅解与支持。

明年,您将在《我的物理世界》栏目中,看到第 22 届国际物理奥林匹克竞赛金牌得主的文章,谈他们是怎样迷住物理的。您将在学部委员朱洪元先生主持的《高科技博览》栏目中,看到科学家们是怎样在高科技领域里取得令人瞩目的成就。由学部委员钱临照、黄昆、卢鹤绂先生主持的《物理前沿》、《中青年物理学家论坛》、《物理学家回忆录》栏目,将以新的面貌出现在您的面前。本刊还将推出:《与科学家对话》、《中学物理辅导》、《大学物理研究》、《寄语我的学生》、《导师纵横录》、《博士学位论文摘要》……。

我们期待您的选择! 欢迎订阅《现代物理知识》!