

中子波性的应用——热中子衍射

施 义 晋

小 陈: 张老师,您好! 我最近又重新阅读了《谈谈微观世界的波粒二象性》一文,感到很有启发. 文章说,微观粒子既有粒子性,又有波动性,这真是奇妙又有趣的事. 但我还不太明白. 您能不能举一个具体的例子来说明微观粒子是一种波呢?

张老师: 当然可以! 我就举一个很有实用价值,已经发展成一门新技术的“热中子衍射”这个例子. 你大概总知道什么叫热中子吧!

小 陈: 这我知道,热中子是反应堆中裂变反应产生的中子经过减速剂的慢化,速度分布达到了平衡…….

张老师: 对! 这个速度分布通常称为麦克斯韦速度分布. 由于麦克斯韦分布完全由温度决定,因此我们称满足这个分布条件的中子为热中子,它们平均来说大约每个中子的能量为 25 毫电子伏特. 当温度升高时,这个平均能量也升高. 25 毫电子伏特就相当于 17°C 的温度. 我这里有一张表,上面列了一些数据,你可以看出热中子的特性了!

表 1 波性、粒子性的几个特征数据

	X 射线	中子	电子
能量	6000 电子伏	30 毫电子伏	100 电子伏
波长	2 埃	1.7 埃	1.2 埃
波数	3.1 埃^{-1}	3.8 埃^{-1}	5.1 埃^{-1}
频率	1.5×10^{18} 赫兹	7.3×10^{12} 赫兹	2.4×10^{16} 赫兹
速度	光速	2400 米/秒	6.6×10^6 米/秒

小 陈: 噢! 原来 30 毫电子伏特的中子、100 电子伏特的电子、6000 电子伏特的 X 射线的波长都差不多,但它们的频率却相差很远.

张老师: 对! 它们的频率相差很远. 但是有一种现象它仅仅与波长有关.

小 陈: 你说的是衍射现象吧?

张老师: 对! 波现象中一个很重要的现象就是衍射现象,衍射是波的特性. 粒子运动的特点是在没有外力作用时,将沿直线进行(按牛顿力学). 而衍射现象告诉我们: 波是可以“拐弯”的. 因此衍射是一个纯粹的波现象. 当 1891 年伦琴发现 X 射线之后,特别是在 1912 年知道了 X 射线是波长为几埃的电磁波时,

冯·劳埃就提出了利用它来研究晶体结构的设想,这就是在 1913 年由布拉格父子实现的有名的布拉格衍射.

小 陈: 张老师,我还不不太懂布拉格衍射,你能否说得详细点呢?

张老师: 这就话长啰! 先来说说晶体,你知道绝大部分固体都是由晶体构成的. 譬如说我们通常吃的盐,就是由氯化钠晶体构成的,在氯化钠晶体中氯离子与钠离子相间地排列在立方格子的顶点上. 你可以先看看图 1,世界上有各种各样晶体,具有不同型式的格子结构,有正方体、长方体、六角棱柱、斜方棱柱……等等格子结构. 按照对称性理论,晶体共有 14 种空间型式格子,再加上每种格子内原子配置的花样,可以构成 230 种不同的花样,当然再加上构成晶体的元素不同,就可以形成 443 万种晶体. 我们知道晶体的不同结构决定了晶体材料的物理、化学性能,如同样的碳元素形成的石墨与金刚石,仅仅由于晶体结构的不同,金刚石成为世界上最硬的材料,而石墨则软得用指甲也能划出痕迹来.

小 陈: 所以,要获得新性能的材料,我们首先必须掌握晶体结构的知识.

张老师: 怎么了解晶体结构的知识呢? 衍射现象给我们提供了有力的工具,至少我们可以利用它把晶体的几何结构,原子配置测定出来. 刚才说过晶体是由原子或离子规则排列而成的,就是说在晶体中存在着由原子离子规则排列而成的网格点阵,当我们用波长 λ 为几个埃的 X 射线照射在晶体上,这些规则排列的原子、离子就成了 X 射线的散射中心,就像一个完整的空间光栅,从各个不同的散射中心散射出来的 X 射线便会相互叠加而引起干涉,当满足布拉格条件 $n\lambda = 2d\sin\theta$ 时, X 射线在某一个散射方向 θ 上形成最强的亮线. 这就是布拉格衍射, n 是正整数, d 是晶面之间的距离,亦即二层原子间的距离, θ 是入射和散射 X 射线与晶面的夹角. 因此,只要知道了 X 射线的波长 λ , 与入射角 θ , 就可以测定晶面距离 d , 再通过测量各种衍射条纹的亮度和计算,就可知道晶体的几何形状与原子、离子在其中的配置情况.

小 陈: 噢! 这就是 X 射线的布拉格衍射,那么这是

不是说,同样波长的电子束,中子束也会在晶体上形成布拉格衍射呢?

张老师:对!刚才说过,衍射的发生只是与波长有直接的关系,而与波的本身关系不大,因此衍射现象是波的存在的一个直接证据,既然电子、中子这些微观粒子均是波,而且只要能量恰当,它们的波长可与X射线相比拟,因此它们在晶体中发生布拉格衍射是可以肯定的,1927年电子波性的证实就是依据这个现象.但是由于电子穿透固体的本领极差,一般只能穿透 10^{-3} 厘米的薄箔,因此电子衍射技术一般用于研究固体表面、薄箔或气体分子的结构.而中子则由于它有很多特点,而发展得比较迅速.

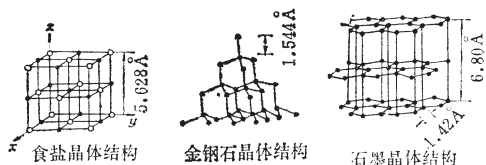


图1 晶体结构举例 ○Cl⁻ ●Na⁺

小 陈:既然X射线研究固体结构很好,为什么又重复发展中子衍射技术呢?我想中子不带电,测量它的装置很庞杂,而且热中子主要从反应堆中得来,这多么不方便啊!

张老师:你知道X射线的测量与获得确实要比中子容易,但X射线也存在着几个不足之处!

小 陈:那么,就是说中子衍射有它的优点?

张老师:对!事物总是要相互比较,才能取长补短.X射线之所以会在晶体点阵所形成的空间光栅上发生衍射,主要因为X射线是一种电磁波,它会与晶体点阵上的原子、离子的外围电子发生作用.我们知道原子如果越重,原子序数越大,它的外围电子也就越多,那么X射线与该原子的作用也就越强.而同样道理,对轻一些的原子,如生命科学中常见的一些元素:碳、氢、氧等,X射线与之作用就要弱多了.

小 陈:噢!张老师,这就是说,用X射线来研究生物大分子结构时,效果就不太理想了?

张老师:对.

小 陈:那用中子又有什么好处呢?

张老师:中子衍射与X射线衍射本质上是基本一样的,它们的不同之处主要在于它们发生衍射的作用机制不同,X射线靠的是与电子的作用,而中子则是直接与原子中的原子核发生作用而引起衍射的.我们知道,不管原子多重,一个原子只有一个原子核.因此不像X射线,中子与轻元素原子的作用不一定比重

元素的原子弱.对于这一点,我们只要看一看图2就会明白的.图2上画出了中子与各种元素或原子核相互作用的大小,通常我们用散射长度 b 来表示这个量.你可以看到,很重的铌(Nb)并不比很轻的氯(Cl)与中子的相互作用更强.

小 陈:嗯, b 好像是跟原子序数的关系不大,张老师,这是不是说中子衍射对轻元素与重元素同样有效?

张老师:你知道,所谓散射长度可以比拟为中子与该

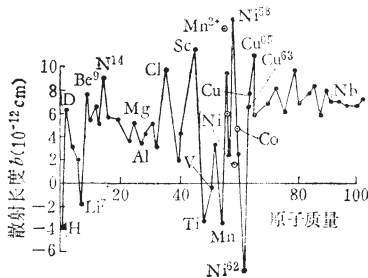


图2 热中子散射长度
●核散射 ○磁散射

原子核碰撞时原子核的有效半径,当中子落入这个半径之内,中子与原子核就会发生碰撞.但你可注意,这个 b 值一般很小,因此对重元素来说,用X射线有利得多.但当轻元素为主构成的晶体中,如果有若干重元素原子在其中,轻元素的定位,用X射线衍射就比较困难.而中子衍射则能把轻元素的效应增强.因此当用X射线基本上确定了晶体结构之后,可以用中子衍射来进一步确定轻元素在其中的位置.这二种方法可以取长补短.

小 陈:噢!生物分子中多的是轻元素,因此在X射线最不能发挥作用的地方,中子倒正是最拿手的地方.

张老师:对了.在当前生物大分子的结构研究中,特别是氢元素在这些大分子中的位置确定,中子衍射扮演了不能取代的角色.

小 陈:大自然安排得真巧妙,当X射线无能为力时,又给送来了中子.

张老师:中子的好处还有几点.你可以再从图2中看出,原子序数相差无几的相近元素的散射长度很不相同,绝对值可以差好几倍,因此如果要在晶体中识别它们的配置,用X射线就不太好办,而中子则可分辨得开.当然这个长处只有在不多情况下有用.但另有一长处带来了很大方便.这就是中子的高透射本领.我们知道中子不带电,它仅与原子核相互作用,而原子核的截面积只是原子的一亿分之一,因此中子在物质中可以穿透很长距离,由此也可得出,中子衍射是在晶体的深层上发生

的。而X射线是与电子发生作用，它只能穿透很薄一层晶体，因此X衍射是在浅层上发生的。由于这个特点，X衍射与所要研究的物体的表面状态有很大关系，如果表面处理得不好，可能得到完全错误的结果，……。

小 陈：那么，中子衍射与表面关系不大。

张老师：对！不仅与表面关系不大，而且有必要时我们还可加一外套，也不会太大影响结果。

小 陈：加外套干什么？

张老师：例如我们要研究晶体结构与温度的关系，特别是相变临界点上下，晶体结构会发生变化，物质性质也截然不同。要研究这个课题，就要把研究对象置于不同温度环境下，例如放在杜瓦瓶中，这对X射线来说是不容许的，而中子衍射则可照样做，只要考虑扣除杜瓦瓶带来的误差就行了。

小 陈：这个好处就大多了，一个完全不能做，一个照做不误。

张老师：还有一点，这也是X射线办不到的，你知道，中子虽然不带电，但它有磁矩，因此它能和磁性原子发生磁作用，引起附加在通常衍射上的‘磁性’衍射。这个作用虽弱，但很有用，可以用来揭示磁性材料的微观结构，研究磁性原子在晶格点阵中的位置与指向。

小 陈：嗯，很有意思，我原来也没想到中子磁矩这种微观性质对研究宏观材料也会有用，张老师。那么中子自旋对衍射会有什么用处呢？

张老师：想得好，我们就是要敢于想像，敢于提出问题。你说的实际上就是极化中子束在衍射上的应用。目前得到极化中子束还比较困难，而且它的强度也不够大，因此对它的研究尚未充分开展，可以相信，极化中子束将来一定会大显身手的。