

α -碘酸锂单晶在外电场作用下 中子衍射增强的各向异性

杨 桢 李 强

(中国原子能科学研究院)

1987 年 6 月 19 日收到

提 要

在四圆中子衍射仪上对 α -碘酸锂单晶在外加直流电场作用下的中子衍射强度增大和各向异性作了系统的测定。对测定结果的分析表明：在场强不大时，衍射的增强及其各向异性可以用经典的各向异性消光理论得到较好的说明。

α -碘酸锂单晶在外加静电场作用下的中子衍射增强^[1]及其他效应^[2,3]曾被广泛研究。根据这些结果，曾设想过中子衍射强度的增大是基于消光改变，即由于晶体内部的载流子在外电场作用下的迁移过程中在晶体表面层和内部缺陷附近富集而导致的晶格畸变或镶嵌结构的改变，从而放宽了衍射的布喇格条件所引起。但是，对于在发现这一现象时即已观察到的、衍射增强效应的显著各向异性，看来用镶嵌的改变来说明又有一定的困难^[1]。对这个疑点，由于当时实验手段简单，尚不能对全空间的各向异性作系统的测定，因而尚不能作出细致、定量的探讨。为此，我们最近用新建成的中子四圆衍射仪比较完整地收集了 α -碘酸锂单晶在不同外电场下全空间的衍射强度变化，并试用经典的消光理论对数据进行了定量的拟合分析。

衍射测定是在本院的重水反应堆旁的四圆中子衍射仪上进行的。仪器性能为： $\lambda = 1.69 \text{ \AA}$ ， $\Delta\lambda/\lambda = 0.045$ ，样品处中子强度 $\approx 5 \times 10^7$ 中子/cm²·s。衍射数据由 Honeywell-Bull 的 Mini-6 计算机进行自动收集。单晶样品来自山东大学晶体材料研究所。由于本工作旨在探索消光效应，选用了较大的、直径和 c 向高度均为 4mm 的晶粒，电极用金蒸发在两个 c 切面上构成，导线、电源等全部几何均考虑到尽量减小杂散的中子散射和吸收效应。

实验共测定了五十多个不同晶面在不加外电场 ($V = 0$) 和加同号 (指电场极性与晶体极性相同) 6V, 15V, 60V 及 120V 四种不同外电场下的衍射积分强度 (衍射峰面积)。表 1 中列出了典型的数据：0V，弱场 (6V，此时增强率随场强变化很快，可达约每伏 60%) 及强场 (120V，增强率仅每伏 2%) 的结果；同时也列出了各晶面与 x - y 晶面间的偏角 γ 作为增强效应的参考。

从实验数据可以看出， α -碘酸锂单晶在静电场中引起的中子衍射增强具有极明显的、对 c 晶轴的各向异性。这和将 α -碘酸锂单晶经液氮冷冻后导致的纯镶嵌改变所引起

表 I 不同场强下中子衍射的增强及其各向异性

h	k	l	0V I	6V I	120V I	$\tau(^{\circ})$
0	1	0	28.40	27.10	27.94	90
0	2	0	80.67	79.80	78.33	90
0	3	0	46.80	43.23	43.80	90
0	4	0	30.15	27.26	25.69	90
1	3	0	48.82	45.51	44.01	90
1	2	0	27.39	26.71	27.04	90
1	1	0	25.62	25.65	26.03	90
1	0	0	33.95	33.02	34.34	90
2	0	0	83.99	83.16	85.68	90
2	1	0	59.97	58.18	56.36	90
2	2	0	39.61	35.22	34.23	90
3	1	0	62.52	53.92	53.42	90
3	0	0	44.47	42.60	44.27	90
4	0	0	27.86	26.36	28.23	90
0	4	1	16.76	17.53	25.77	77.1
4	0	1	17.41	16.26	28.03	77.1
1	3	1	21.62	21.63	34.66	75.8
3	1	1	86.34	92.59	163.52	75.8
2	2	1	19.06	18.40	28.93	75.2
1	2	1	25.58	27.80	44.50	70.9
2	1	1	55.71	63.45	114.35	70.9
0	2	1	62.34	73.57	120.59	65.8
2	0	1	74.66	93.64	186.85	65.8
1	3	2	80.76	103.75	176.33	63.1
3	1	2	23.49	29.57	48.01	63.1
2	2	2	24.98	31.76	51.85	62.1
1	1	1	89.78	109.55	202.20	62.1
0	3	2	28.16	36.32	57.89	58.6
3	0	2	31.42	44.12	73.11	58.6
1	2	2	72.52	104.75	180.97	55.3
2	1	2	17.34	22.52	32.64	55.3
0	1	1	73.88	102.59	215.68	47.5
1	0	1	79.78	103.10	242.31	47.5
0	2	2	22.61	31.50	48.61	47.5
2	0	2	25.07	35.56	55.22	47.5
1	2	3	25.58	40.31	59.54	43.9
1	1	2	60.23	99.55	178.46	43.4
0	2	3	79.91	134.43	229.57	36
2	0	3	94.81	180.16	302.63	36
1	1	3	57.07	105.34	174.90	32.2
0	1	2	38.15	64.76	119.35	28.6
1	0	2	42.56	72.88	129.33	28.6
0	2	4	24.23	37.95	54.04	28.6
2	0	4	25.10	44.06	62.74	28.6
1	1	4	56.58	106.22	170.91	25.3
0	1	4	12.67	19.37	25.24	15.2
1	0	4	13.65	20.60	26.70	15.2
0	0	2	147.73	311.10	570.62	0
0	0	4	59.89	100.00	209.74	0

的、完全各向同性的衍射增强显著不同¹⁾, 而与某些极性、准一维离子导电晶体如 KTP 单晶在外电场下中子衍射增强的各向异性^[4] 极其相似。

作为一种试探, 我们用了经典的中子消光方面 Zachariasen, Cooper, Becker 等三人的理论加上各向异性因子按一、二类晶体^[5-7]进行了数据拟合。结果是, 仅在弱场下 (6V) 用 Zachariasen 一类晶体的拟合得到较理想的 R 因子 (4.5%)。它说明在场强和增强率都大的情形下, 可以引入一般的嵌镶改变的概念, 这和从其他方法如光散射^[8,9]、X 射线形貌^[2]、导电管道^[10]等实验上看到的、外电场引起晶体内部非均匀现象是一致的。

尚待探讨的是在高场强下的衍射增强各向异性。它不能用传统的消光处理得出良好的拟合。我们曾用仿结构因子一个各向异性参量的方式得出好的结果, 但是, 在尚未能从其他方面证实 α -碘酸锂在这样弱的电场中有结构改变的迹象时, 我们宁愿不太早下结论, 而把这一切都作为下一步的研究起点。

程玉芬、成之绪两位同志协助我们进行了衍射测量, 谨在此致以谢意。

参 考 文 献

- [1] 杨 楨、程玉芬、牛世文、李荫远, 物理学报, **24**(1975), 6.
- [2] 古元新、葛培文、赵雅琴、胡伯清、吴兰生、傅金贵, 物理学报, **29**(1980), 711.
- [3] 张光寅、刘 键、冯尚婷, 物理学报, **33**(1984), 710.
- [4] YANG Zhen, *Chinese Phys. Lett.*, **4**(1987), 533.
- [5] W. H. Zachariasen, *Acta Cryst.*, **23** (1967), 558.
- [6] M. J. Cooper, K. D. Rouse, *Acta Cryst.*, **A26**(1970), 214.
- [7] P. J. Becker and P. Coppens, *Acta Cryst.*, **A30**(1974), 148.
- [8] 杨华光, 物理学报, **29**(1980), 1139.
- [9] 许政一、杨华光、李荫远, *Scientia Sinica*, **26**(1983), 637.

ANISOTROPY OF THE NEUTRON DIFFRACTION INTENSITY ENHANCEMENT EFFECT OBSERVED IN α -LiIO₃ SINGLE CRYSTAL UNDER SMALL DC VOTLAGE

YANG ZHEN LI QIANG

(Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275, Beijing)

ABSTRACT

The strong anisotropy of the neutron diffraction intensity enhancement effect observed in α -LiIO₃ single crystal under dc voltage was investigated systematically with a 4-circle neutron diffractometer. Analysis of the result shows that both the enhancement and its anisotropy can be explained in the framework of the classical neutron diffraction extinction theory only if the applied dc voltage is low enough.

1) 程玉芬, 私人通信.