

α -LiIO₃ 单晶体在静电场作用下 X 射线双晶衍射的研究*

梁 敬 魁 易 孙 圣

(中国科学院物理研究所)

提 要

本文用 X 射线双晶摄谱仪观察了 α -LiIO₃ 单晶体的不同晶面在各种方式外加电压作用下, 双晶衍射曲线半高宽 W , 最大反射系数 $k_B(0)$ 以及积分反射能力 R 的变化。

对于 $k_B(0)$ 随所加电压和加电压时间的改变有一最大值的现象, 我们提出了 α -LiIO₃ 单晶体在静电场作用下 IO₃⁻ 离子沿 z 轴移动和绕 z 轴转动的可能解释。

一、引 言

α -LiIO₃ 单晶体是非铁电性的电极性晶体^[1,2], 其空间群为 $P6_3$. 每单胞中含有两个分子式, 点阵常数和原子位置均已被测定^[3-5]. 可用水溶液法生长出光学品位高的单晶体, 具有良好的电光和压电性能, 因而常被用作激光技术中的倍频器和水浸探伤的换能器^[6,7] 近年来, 我国科学工作者对 α -LiIO₃ 单晶体在静电场作用下中子衍射的增强, 光学和电学性能的变化, 曾进行过广泛而深入的研究^[8-12,18].

为了探明 α -LiIO₃ 单晶在外加电压作用下中子衍射、电学、光学等异常现象的原因以及它与晶体结构的内在联系, 有必要进行 X 射线衍射实验并进行对比。

中子衍射(其贯穿本领强)以及光学和电学实验所观察到的都是整体效应, 而 X 射线则即使采用最常用的短波长 MoK α , 对 α -LiIO₃ 的 (006) 晶面来说, 90% 以上的衍射强度的贡献是在表面层 40 微米以内的。表层 10 微米就有 50% 的贡献。

要用 X 射线衍射观察晶体在外加电压作用下的变化, 就必须用比通常的衍射设备更为精密的双晶摄谱仪, 我们在国产 YS-1 型衍射仪上增加了一些附件, 改装成双晶摄谱仪, 以观察电压施加在不同轴向(沿 z 轴方向和 x 轴方向)时对 X 射线衍射所产生的影响。

二、实验部分

1. 实验装置 我们按双晶 (n , $-n$) 平行排列衍射的基本原理^[13-15], 在国产 YS-1 型衍

* 1976 年 7 月 13 日收到; 1977 年 9 月 17 日收到修改稿。

射仪测角计的平面单色器的晶架上, 安装第一块晶体 *A*, 样品台上放置待研究的晶体 *B*. 为了能观察到样品台转动 1 角度秒的位移, 我们用杠杆放大的方法, 在测角计的样品台上固定一根刚度大的不锈钢杆, 在杆的另一端距样品台中心为 206 毫米处固定一分表. 一分表上读数变化千分之一毫米 (1 格), 相当于样品台转动 1 角度秒. 在转动样品台的轴上固定另一根长 180 毫米的钢杆, 用来转动样品台. 这样用 YS-1 型衍射仪测角计改装后的双晶摄谱仪便能精确测量样品台 1 角度秒的转动.

2. 样品的制备 研究用的 α -LiIO₃ 单晶是我所碘酸锂晶体生长小组提供的, 具有完整的外形和良好的透明性^[16].

双晶摄谱仪对晶体试样的要求, 首先是 X 射线所能观察到的几十微米的表面层内没有损伤, 要能反映晶体本身的状态. 其次要求晶体的表面与所观察的晶面相一致, 所观察的晶面必须垂直于 X 射线的入射线与反射线所构成的平面.

试样分二组: 一组是观察 (00*l*) 晶面的晶片, 垂直于 *z* 轴切割, 对于沿 *z* 轴向加电压的晶体, 其厚度为 2—3 毫米, 而在 *x* 轴向加电压, 为了便于配备电极, 其厚度为 7—8 毫米; 另一组是观察 (*h*00) 晶面的晶片, 沿自然生长面切割, 对于 *x* 轴向加电压的晶体, 其切割厚度为 2—3 毫米, 而沿 *z* 轴加电压的晶体, 其厚度为 7—8 毫米. 晶体经过研磨之后用酒精加水作为溶剂进行化学抛光. 经这样处理后的晶体用双晶摄谱仪检查, (00*l*) 晶面的半高宽 *W* 多在 20 角度秒以下, 质量好的晶体可小到 10 角度秒左右. 而对于 (*h*00) 晶面, 则半高宽 *W* 多在 30 角度秒左右, 这与晶体本身的均匀性有关. 研究用的晶片经 X 射线鉴定, 其表面与所要观察的晶面最大偏差不得超过 2 角度分.

抛光好的晶片, 放在真空镀膜仪内喷镀电极. 凡是观察面与外加电压面重合时, 则为了减少对 X 射线的吸收, 镀 10 微米左右的 Al 膜. 如果所要观察的晶面与外加电压的晶面垂直, 则镀 Au 膜. 镀好电极的晶片, 用双晶摄谱仪检查, 确证喷镀电极前后双晶衍射曲线没有变化.

为了消除仪器的几何发散度色散所造成的影响, 晶体 *A* 与晶体 *B* 我们选用同一晶面切下来的晶片.

3. 实验条件 当 X 射线的衍射面与电极面一致时, 其外加电压的线路和试样在样品台的位置如图 1 所示.

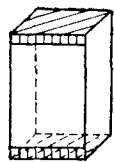


图 2

图 2 是当衍射面与电极面垂直时的测试样品, 荫蔽部分镀 Au. 样品架的压板换成绝缘的聚四氟乙烯或有机玻璃, 试样用聚四氟乙烯架与样品台绝缘. 电极从绝缘架导出.

电源用乙电池. 充、放电回路串有微安表, 以便观察晶体在充、放电时的情况.

为了提高 X 射线对晶体的穿透本领和有足够的人射强度, 我们采用 MoK α 辐射. 同

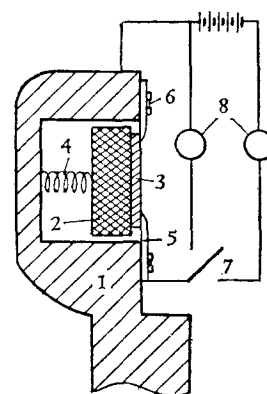


图 1 充电、放电线路示意图

- 1—样品架; 2—有机玻璃;
3—样品; 4—弹簧;
5—压板; 6—螺丝;
7—开关; 8—微安表

时考虑到谐波给实验可能带来的影响,我们降低X射线管的激发电压(不超过30千伏)并用Zr箔作滤波片. 实验表明,在通常的情况下,谐波的影响是很小的.

三、实验结果

1. 沿z轴加电压, 观察(006)晶面 由于面指数较高的晶面具有较高的灵敏度,在电压加在z轴方向的情况下,我们主要研究(006)晶面. 由于 α -LiIO₃晶体是电极性晶体,垂直于z轴有正极面和负极面之分^[1],因而这里存在着四种情况:(1)晶体的负极面施加正电压;(2)晶体的正极面施加正电压;(3)晶体的负极面施加负电压;(4)晶体的正极面施加负电压.

我们详细地观察了在固定外加电压的情况下,双晶衍射曲线随时间的变化,或固定加电压时间的情况下,双晶衍射曲线随外加电压数值的变化.

图3是有代表性的双晶衍射曲线在电压作用下的变化情况,转动晶体B(在峰值周围

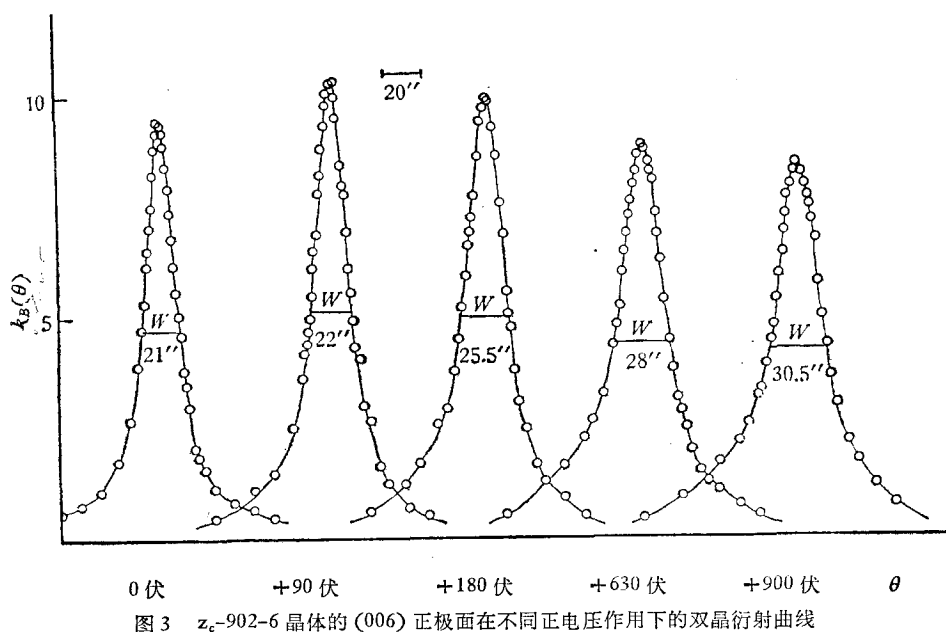


图3 z_c-902-6晶体的(006)正极面在不同正电压作用下的双晶衍射曲线

相隔0.5或1角度秒),定时(30秒钟)记录晶体B在不同位置时的反射系数 $k_B(\theta)$,描绘双晶衍射曲线。 $k_B(0)$ 表示晶体B与晶体A处于平行位置时反射强度与入射线强度的比值,即晶体的最大反射系数。 W 是双晶衍射曲线强度最大值一半处的全宽度(半高宽)。 $k_B(0)$ 与 W 反映着晶体的完整性, $k_B(0)$ 愈大, W 愈小,则晶体的完整性愈高。 R 表示晶体的积分反射能力,它相当于双晶衍射曲线所包围的面积. 图4是 $k_B(0)$ 在充、放电过程中随电压和时间而变化的记录照片. 每次放电到微安表读数为零后,把晶体B调到平行位置再进行下次充电. 图5—10是不同完整性晶体在上述四种不同情况下 $k_B(0)$, W , R 随外加电压和时间的变化. 从(006)晶面在电压作用下所得的结果,可以看出:

(1) 观察面(无论是正极面还是负极面)施加正电压时,双晶衍射曲线的 $k_B(0)$, W , R

随电压或加电压时间的变化都比加负电压时明显。同时,同号充电(晶面的极性与施加电压的极性相同者称同号,如晶体的正极面充正电压;相反者称异号)由于充电电流大,电压作用所产生的变化速度要比异号充电快。这与静电场作用下 α - LiIO_3 中子衍射增强同号充电快于异号充电的情况相同。

(2) 最大反射系数 $k_B(0)$ 随外加电压和时间的变化,对于上述四种情况都是相同的。当施加电压不变, $k_B(0)$ 起初随所加电压的时间加长而增加,随后下降。对于某一外加电压有其相应 $k_B(0)$ 达到最大增值的时间。外加电压愈高,达到 $k_B(0)$ 最大增值所需的时间愈短。当外加电压很高时,由于 $k_B(0)$ 最大增值所需的时间极短,可能实际上观察不到 $k_B(0)$ 的增值。当加电压的时间不变, $k_B(0)$ 最大增值也有一相应的电压。加电压的时间愈短,相应的电压愈高。当外加电压时间很长时,有的晶体观察不到 $k_B(0)$ 的增值过程。

(3) 半高宽 W 在正电压的作用下,无论是正极面还是负极面都随加电压的时间和电压的数值而增加,开始迅速,而后缓慢。但在负电压的作用下,对于负极面,在加电压时间不很长的情况下,初期随电压的增加 W 加宽,而后下降,其数值可能比未加电压时的 W 还要小,如加电压的时间很长,则只能观察到 W 变小。对于正极面,则 W 在实验误差范围内不随外加电压和时间而改变。

(4) 积分反射能力 R 相应于最大反射系数 $k_B(0)$ 与半高宽 W 的乘积。在正电压的作用下,无论是正极面还是负极面, R 随电压和加电压时间都是初期迅速增加,而后缓慢,趋于平衡或稍下降,但都比未加电压前大。在负电压的作用下,则对于晶体的负极面 R 随外加电压和时间初期增加,达最大值后下降,其数值比未加电压前还要低。对于晶体的正极面, R 初期也是增加,而后下降,随后保持不变,但其数值比原来未加电压时大。

(5) 在正电压的作用下,对于负极面, $k_B(0)$ 高和 W 小的完整性高的晶体,充电后达到相同程度变化所需要的电压和时间要比完整性差的晶体高和长。这就是说,完整性高的晶体的负极面在正电压作用下的变化速度慢。对于正极面,则与此相反,完整性愈高的晶体,愈容易受电压的影响。

(6) 在正电压的作用下,如晶体经短时间充电后,即行放电,则对于晶体的负极面,最大反射系数 $k_B(0)$ 并不回到未加电压前的数值,而是比未加电压时的数值提高约 4—5%; 但半高宽 W 基本上恢复到原来的状态。晶体的正极面与此不同,短期充电后再放电,

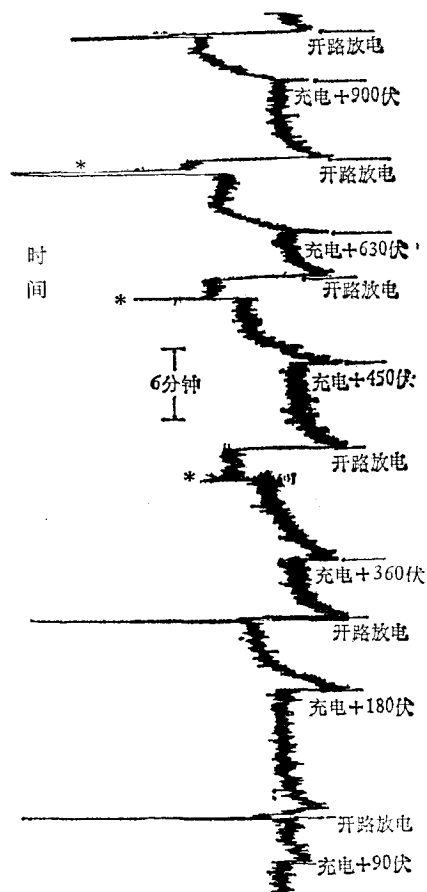


图4 $k_B(0)$ 在充、放电过程的变化
“*”测量双晶衍射曲线10分钟没有记录,衍射强度继续下降

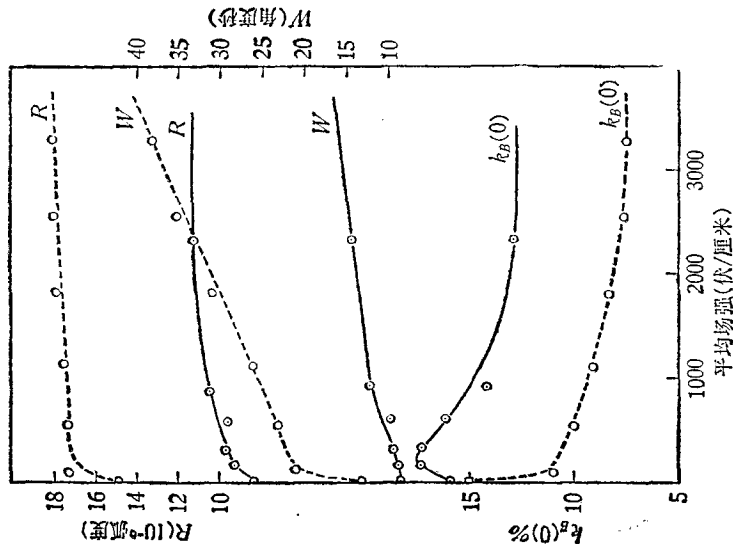


图5 完整性不同的晶体(006)负极面当异号充电至接近平衡时 R , W , $k_B(0)$ 随平均场强的变化

○ — z_c-7-24 , 3.10 毫米厚;
 ○ — $z_c-901-4$, 2.46 毫米厚

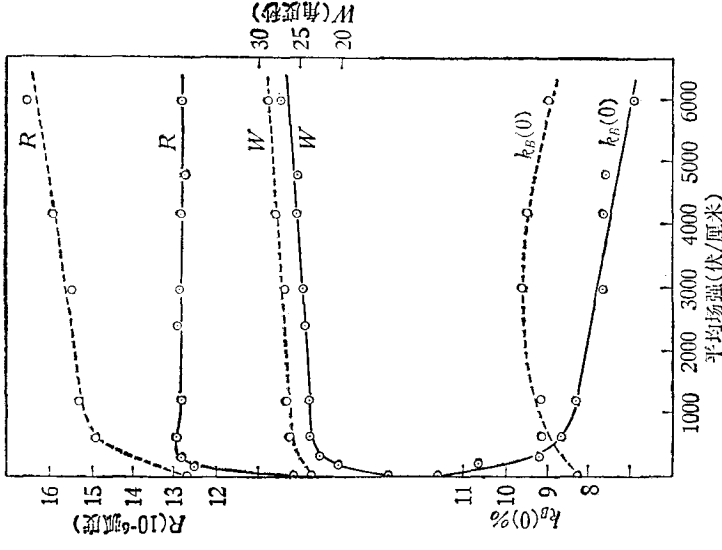


图6 完整性不同的晶体(006)正极面同号充电 R , W , $k_B(0)$ 随平均场强的变化

○ — $z_c-902-5$, 1.48 毫米厚, 加电压 5 分钟;
 ○ — $z_c-902-8$, 1.48 毫米厚, 加电压至接近平衡态

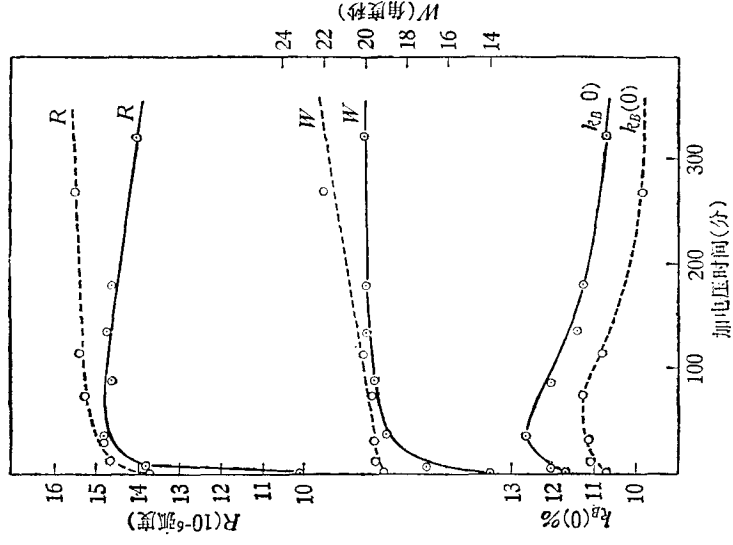


图7 完整性不同的晶体(006)正极面在正电压(+22.5 伏)作用下 R , W , $k_B(0)$ 随加电压时间的变化

○ — $z_c-902-5$, 1.48 毫米厚;
 ○ — $z_c-902-8$, 1.48 毫米厚

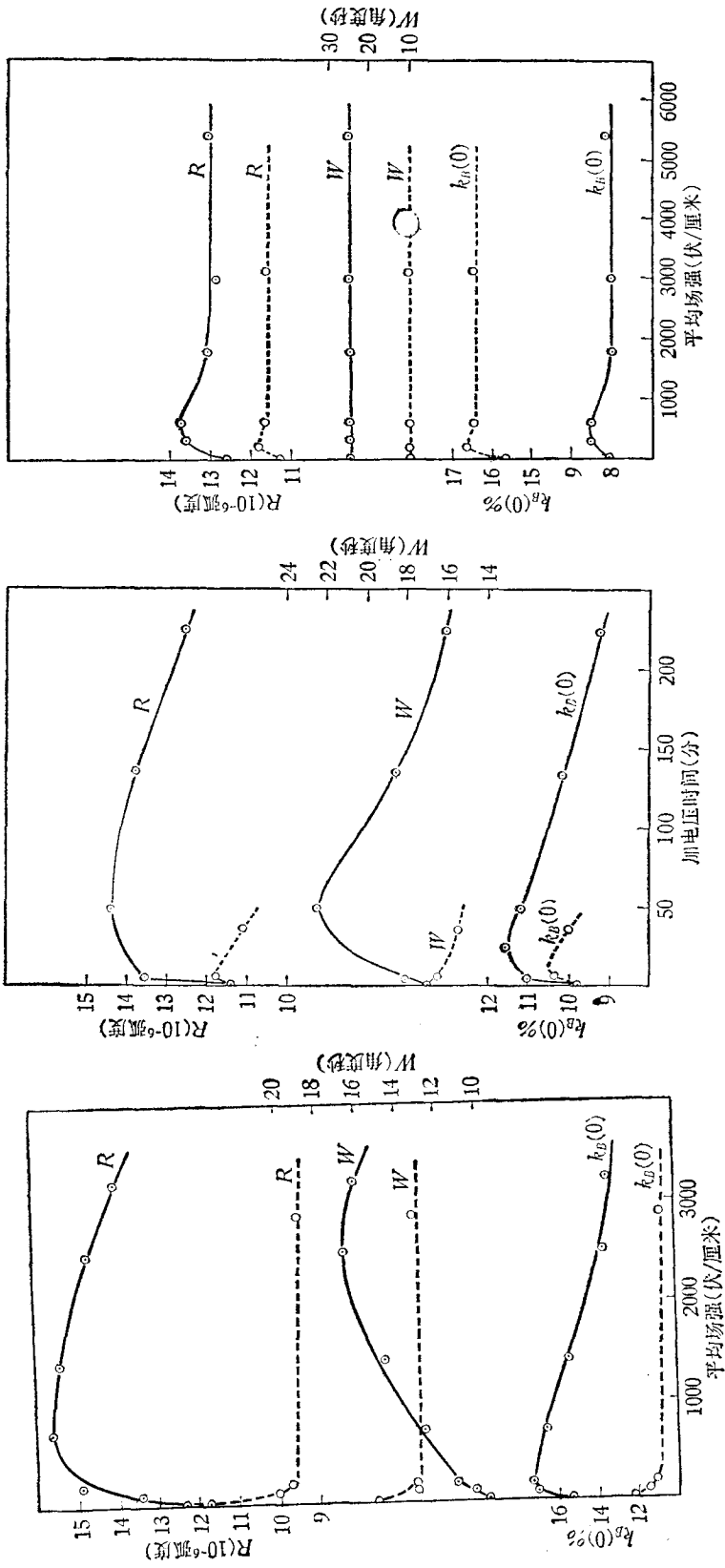


图8 完整性不同的晶体(006) 负极面当同号充电时 $R, W, k_B(0)$ 随平均场强的变化
 ○—— z_c-7-2 , 3.10毫米厚, 充电至接近平衡态;
 ○—— $z_c-901-7$, 2.46毫米厚, 充电电压7分钟

图9 晶体 $z_c-901-1$ 的(006) 负极面在负电压(-22.5伏;-45伏)作用下, $R, W, k_B(0)$ 随充电时间的变化
 晶体厚度(电极间距)2.46毫米, 充电-45伏, 36分钟Al箔开始脱落, 终止实验
 ○——充-22.5伏; ○——充-45伏

图10 完整性不同的晶体(006) 正极面在负电压作用下 $R, W, k_B(0)$ 随平均场强的变化
 ○—— $z_c-902-2$, 1.48毫米厚;
 ○—— z_c-7-3 , 2.30毫米厚

$k_B(0)$ 与 W 都不能恢复到原始的状态, $k_B(0)$ 比原来的小, 而 W 比原来的大。

此外, 为了进行比较, 我们还观察了(004), (002)晶面的双晶衍射曲线, 所得结果是: W 与(006)晶面相近, 但 $k_B(0)$ 与 R 的数值是(002) > (004) > (006)。在静电场作用下, 其变化趋向与(006)晶面相同, 但变化的明显程度是(006) > (004) > (002)。

2. 沿 x 轴加电压, 观察(300)晶面 沿 x 轴加电压, 分别观察了衍射面加正电压和负电压时对(300)晶面双晶衍射曲线半高宽 W 、最大反射系数 $k_B(0)$ 以及积分反射能力 R 的影响。

在晶体的观察面上施加负电压时, 电极间距为 2 毫米, 电压一直加到 1620 伏, 才开始观察到 W 加宽 1 角度秒, $k_B(0)$ 增加 3—5%, 而后保持不变。沿晶体的观察晶面加正电压时, 电极间距为 2 毫米, 加电压 400 伏 1 小时, 就可以观察到 W 加宽 2—3 角度秒, 继续增加电压和延长时间, 则基本上保持不变。 $k_B(0)$ 开始增加 5% 左右, 而后下降。

3. 电压施加方向与观察晶面相垂直 这种情况电场与观察面不一致, 电场在观察面发生畸变, 难于确定其分布情况, 但是观察面仍然受到电场的影响。这里只作定性的介绍。

(1) 沿 z 轴加电压, 观察(300)晶面

根据 α -LiIO₃ 晶体结构的对称性, 垂直于 x 轴的 ($h00$) 晶面都是等效的, 因而这种情况只有充电方式的不同。我们分别观察了沿 z 轴同号加电压和异号加电压对(300)晶面的影响, 所得结果均与(006)晶面相似, 但其影响程度小于(006)晶面。双晶衍射曲线的半高宽 W 随电压和加电压时间的增加而加宽, 最大反射系数 $k_B(0)$ 开始随电压和加电压时间的增加而加大, 尔后下降。显然积分反射能力 R 也是随电压和加电压时间而增加的, 开始迅速, 而后缓慢。

(2) 沿 x 轴加电压, 观察(006)晶面

这种情况加电压只可能有一种方式。我们分别观察了电压对(006)晶面的正极面和负极面的影响。对于一小部分完整性较差、半高宽 W 大的样品, 两电极间距为 17—18 毫米, 电压加到 1620 伏时, 没有观察到 W 和 $k_B(0)$ 的变化。对于大部分完整性较好的晶体, 则在 1620 伏电压作用下, W 加宽 1—2 角度秒, $k_B(0)$ 增加 2—3%。

四、讨 论

沿 z 轴加电压时, 四种情况都观察到 $k_B(0)$ 的增加, 但其增值不同, 不同的晶体由于完整性不同也各有差异。放电后, 在外加电压时间不很长的情况下, 有的晶体 $k_B(0)$ 不恢复到原始状态, 而是比原始状态高, 有的可恢复到原始状态或稍低些。而当外加电压的时间很长, 或外加电压很高时, 则 $k_B(0)$ 总是要下降的。这似乎表示着: 在充电和放电过程中有两种对立的因素在影响着双晶反射强度的变化。一种因素使反射强度增加, 另一种因素使反射强度降低。在不同的条件下, 其中的一种因素起着主导作用, 因而表现出衍射强度的增加或减小。晶体对 X 射线的反射强度取决于晶体的结构因子和晶体的完整性。我们设想, 是否可能由同一个内因, 产生着对反射强度影响相反的因素。

α -LiIO₃ 的晶体结构已被确定^[7,8], 其空间群为 $C_2^2(P6_3)$, 每个单胞含有两个化合式量,

即每个单胞含有两个 Li⁺, 两个 I^V 和六个 O^{II}. 它们所占据的空间位置为

$$2\text{Li}^+ \text{ 分布在 } 2(a) \text{ 等效位置上: } (0, 0, z); (0, 0, \frac{1}{2} + z); z = 0.9461^{[8]}.$$

$$2\text{I}^{\text{V}} \text{ 分布在 } 2(b) \text{ 等效位置上: } (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z); (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + z); z = 0.$$

$$6\text{O}^{\text{II}} \text{ 分布在 } (6c) \text{ 等效位置上: } (x, y, z); (\bar{y}, x - y, z); (y - x, \bar{x}, z); \\ (\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z); (y, y - x, \frac{1}{2} + z); (x - y, x, \frac{1}{2} + z).$$

$$x = 0.0957, y = 0.3437, z = 0.1618.$$

对于 α -LiIO₃ 衍射强度主要是由重元素的原子位置所决定的, I^V 和 O^{II} 按一定的键角和键长形成稳定的 IO₃⁻ 离子基团. 因而 I^V 在空间的位置, 基本上决定了 X 射线的衍射强度.

沿 z 轴施加电压时 $k_B(0)$ 的初期明显增强, 这很可能与 IO₃⁻ 离子在静电场作用下沿电场方向移动有关, 当然 IO₃⁻ 离子的移动很可能是由于 Li⁺ 离子在电场下的移动而引起的相对运动. 由于 IO₃⁻ 离子移动, 使反射强度增强, 也可能由于 IO₃⁻ 离子的继续沿电场方向移动, 使晶体产生局部缺陷和点阵常数的局部变化, 从而破坏了晶体的完整性, 又使 $k_B(0)$ 下降.

从 α -LiIO₃ 晶体的结构来看, 在不破坏其对称性的情况下, IO₃⁻ 离子可以沿 z 轴运动. 这里只对双晶衍射强度作定性的讨论. 我们暂且假定在电场的作用下, 除结构振幅外, 其它影响 X 射线强度的因素都保持不变. 因而可以认为反射强度与结构振幅 F 的平方成比例.

$$F = \sum_j f_j(\exp) [(-2\pi i)(hx_j + ky_j + lz_j)] \\ = \sum_j f_j [\cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + i \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)],$$

上式中 f_j 为第 j 元素的原子散射因数.

如果只考虑 I^V, 则对于 (00 l) 晶面,

$$|F|_{00l}^2 = f_{\text{IV}}^2 \left[\left(\sum_j \cos 2\pi lz_j \right)^2 + \left(\sum_j \sin 2\pi lz_j \right)^2 \right].$$

如果确是由于 IO₃⁻ 离子的运动而造成双晶衍射强度的异常变化, 则在相同的电压作用下, z 的变化是相同的. 因而对于 (00 l) 面组, $k_B(0)$ 的增值应该随着 l 的加大而增加. 我们对增值最大的负极面施加正电压, 比较了 (002), (004), (006) 晶面在电场作用下 $k_B(0)$ 的增加, 所得结果见表 1.

沿晶体负极面施加负电压, 以及沿晶体正极面施加正电压或负电压, 不同晶面 (006), (004), (002) 在静电场作用下开始阶段 $k_B(0)$ 都增加. 虽然不同晶体存在着差异, 但 $k_B(0)$ 增值的总趋势与负极面施加正电压的情况相同. 即 $k_B(0)$ 的增值 (006) > (004) > (002).

为了排除不同晶体所可能存在的差异和尽可能地减小晶体经历给实验结果带来的影响, 我们还用同一块晶体, 短时间充电, 长时间放电, 在 z 轴向电压作用下观察 (006), (004), (002) $k_B(0)$ 的增值. 所得结果见表 2.

表 1 (00*l*)晶面组的负极面在正电压作用下反射强度最大值的增值

反 射 晶 面	晶 体 编 号	$k_B(0)$		增加%
		加电压前	加电压后	
(006)	$z_c-901-6$	11.30	13.72	21.4
	$z_c-902-7$	11.83	14.10	19.2
	$z_c-101-1$	7.78	9.37	20.4
(004)	z_c-903	21.70	24.11	11.1
	$z_c-101-4$	16.30	17.78	9.1
(002)	$z_c-902-1$	29.20	30.46	4.3
	$z_c-903-1$	27.80	29.19	5.0

表 2 晶体的负极面在静电场作用下 (00*l*) 的 $k_B(0)$ 的增值

反射晶面	加电压前 $k_B(0)$	电压(伏)	充电电流(微安)	上升时间(秒)	加电压后 $k_B(0)$	$k_B(0)$ 的增值%
(006)	13.75	+180	6	10	15.98	16.3
	13.75	-180	16	<10	14.95	8.7
(004)	26.73	+45—+67.5	5—9	10	28.16	5.3
	26.73	-22.5—-45	4—10	<10	27.44	2.7
(002)	施加电压一直降到 9 伏,充电电流已很小,都没有观察到 $k_B(0)$ 增加现象,可能由于增值很小,在实验仪器误差范围内,因而观察不到。					

实验事实与 I^V 在静电场作用下沿 z 轴移动的假设没有矛盾。同时我们还注意到: 在 z 轴向施加电压时, (300) 晶面 $k_B(0)$ 开始阶段也是增加的。所以可以认为, 整个 IO_3^- 离子基团在静电场作用下, 沿 z 轴方向移动和绕 z 轴转动, 或 O-I-O 键角改变, 而引起 O^{II} 的 x 值的变化, 但始终保持原来的对称性不变。

还必须指出: 对于同一晶体的不同晶面, 在相同的上升时间内, $k_B(0)$ 达到可能最大增值时所需要施加的电压值并不相同。 l 愈大, 所需施加的电压愈高。这个现象可能与 X 射线在晶体中贯穿本领与电场在晶体中的分布有关。

如果在电场作用下, 所有的 IO_3^- 离子沿 z 轴都作相同移动的话, 则从结构振幅的角度来看, 这对衍射强度的改变并无多大贡献, 因为 Li^+ 离子对衍射强度的贡献是可以略而不计的, 这样仍无法解释实验事实。因而, 只能是部分 IO_3^- 离子的运动。我们设想: $\alpha-LiIO_3$ 在生长过程中, 由于生长条件的波动, IO_3^- 离子在空间的位置略有差异, 其 z 值在 0 附近的一个范围内分布, 可能 $z = 0$ 的概率最大, 在电压的作用下, 一部分 I^V 向 $z = 0$ 位置移动, 这样使占据在相同 z 值的 I^V 数目增加, 因而 $k_B(0)$ 增加。当尽可能多的 I^V 达到 z 的同值时, 反射强度达最大值。由于部分 IO_3^- 离子的继续移动, 使占据相同 z 值的 I^V 数目减小, 并产生点阵常数梯度和晶体完整性下降, 这就使 $k_B(0)$ 下降。当施加相反电压时, 处于相反位置的另一部分 I^V 向相反方向移动, 同样使 z 值相同的 I^V 数目增加, 因而 $k_B(0)$ 增加, 在

静电场继续作用下,反射强度又下降.这样就解释了为什么不同极面的四种状态,充电过程的开始阶段都可观察到 $k_b(0)$ 增加,四种状态之间只有增加数量的差异.不同的晶体由于起始状态不同,因而也有差异.放电时发生与充电相反的过程, $k_b(0)$ 通过最大值,而后达到平衡状态.由于晶体原始状态不一样,完整性不同,放电后有的 I^V 没有恢复到原始状态,这就是为什么有的晶体 $k_b(0)$ 不能恢复到原始状态,以及实验结果与样品的经历有关的可能原因.当然,当所施加的电压很高,或加电压时间很长,晶体完整性的破坏起主要作用时,只能观察到 $k_b(0)$ 的下降.

我们粗略估计了 IO₃⁻ 离子的位置沿 z 轴移动百分之几的周期(006)晶面就有可能影响衍射强度至 10—20%. 我们预计在电压作用下, z 值改变百分之几的周期是完全可能的.因为当我们研究 LiIO₃ 相变时^[17],发现当熔态 LiIO₃ 冷却时,由于条件稍有差异,可以形成不同结构的相,这说明了当 IO₃⁻ 离子在空间占据不同的位置时,其自由能的差别是很小的.同时还发现,即使冷却至室温 α -LiIO₃ 衍射线的强度和峰宽仍在改变.这反映 IO₃⁻ 离子在室温下仍在向平衡位置移动, IO₃⁻ 离子在晶胞中移动所需要的能量是很低的.这些事实都说明了在 z 轴向施加电场时, IO₃⁻ 离子沿 z 轴移动和绕 z 轴转动是十分可能的.

α -LiIO₃ 单晶体在静电场作用下的中子衍射实验发现^[8]: 在 z 轴向加静电场晶体的(00 l)晶面反射强度明显增强,并随静电场场强的递增而逐渐加大.中子衍射实验所用的中子衍射仪的几何宽度大,入射中子束波长范围宽.实际上中子衍射所观察到的峰值强度是相应于双晶衍射的积分反射能力.在静电场的作用下,由于 IO₃⁻ 离子沿 z 轴移动和绕 z 轴转动都使得积分反射能力增加,它的增加趋势与中子衍射强度随电压而增强的情况相同,即开始很快地增加,而后缓慢,最后趋于平衡,仅仅增加的数值没有中子衍射那么大.这是可以理解的.因为 X 射线双晶摄谱仪所观察的是晶体的表面,而中子衍射则是整体效应.在 x 轴加静电场,(00 l)晶面积分反射能力仅有微小的增加,这也与中子衍射所得的结果相同.因此可以认为,在静电场作用下, α -LiIO₃ 单晶体中子衍射强度的增强与 X 射线双晶衍射曲线随场强的变化是由同一原因造成的.

参 考 文 献

- [1] 李荫远、范海福、贾寿泉,中国科学,1973,1,96;外文版 *Scientia Sinica*, **16** (1973), 130.
- [2] J. G. Bergman *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **40** (1969), 2860.
- [3] A. Rosenzweig, B. Morosin, *Acta Cryst.*, **20** (1966), 758.
- [4] J. L. de Boer *et al.*, *Acta Cryst.*, **21** (1966), 841.
- [5] A. Эмиралиев и др., *Кристаллография*, **18** (1973), 1177.
- [6] F. R. Nash *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **40** (1969), 5021.
- [7] 北京钢铁研究院探伤组,物理学报, **25** (1976), 82.
- [8] 杨楨、程玉芬、牛世文、李荫远,物理学报, **24** (1975), 6.
- [9] 中国科学院原子能研究所 α -LiIO₃ 研究小组,物理学报, **25** (1976), 129.
- [10] 麦振洪,物理学报, **24** (1975), 385.
- [11] 朱糖、张道范、成希敏,物理学报, **26** (1977), 115.
- [12] 顾本源、毛镇道、成希敏、谢安云,物理学报, **26** (1977), 293.
- [13] K. W. James, *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays* (1954), London.
- [14] A. H. Compton and S. K. Allison, *X-rays in Theory and Experiments* (1954), New York.
- [15] G. Brogren, *Arkiv för Fysik.*, **3** (1951), 507.

- [16] 中国科学院物理研究所碘酸锂小组, 物理, **1** (1972), 28.
[17] 中国科学院物理研究所晶体学室相图与相变研究组, 物理学报, **26** (1977), 199.
[18] 李铁城、许政一, 物理学报, **26** (1977), 500.

AN X-RAY DOUBLE-CRYSTAL SPECTROMETRIC INVESTIGATION OF THE BEHAVIOUR OF α -LiIO₃ SINGLE CRYSTALS UNDER THE ACTION OF ELECTROSTATIC FIELD

LIANG JING-KUI YI SUN-SHENG
(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

The changes of maximum reflection coefficient, half maximum line breadth and integrated reflection power of double-crystal reflection curves in some planes of the α -LiIO₃ single crystal have been investigated under the action of the electrostatic field along the z -axis and x -axis.

Based upon the Experimental fact that $k_b(0)$ is dependent on the applied voltage and the charging time and there exists a maximum value, a possible explanation is suggested by supposing the displacement and rotation of the IO₃⁻ group along and around the z -axis under the action of the electrostatic field.