

国家“十二五”重点图书

现代X光物理原理

Elements of Modern X-ray Physics

Jens Als-Nielsen, Des McMorrow 著

封东来 译

复旦大学出版社

国家“十二五”重点图书

现代X光物理原理

Elements of Modern X-ray Physics

Jens Als-Nielsen, Des McMorrow 著

封东来 译



 复旦大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

现代 X 光物理原理/[丹]埃尔斯-尼尔森(Als-Nielsen J.),[英]麦克莫罗(McMorrow D.)著;
封东来译.—上海:复旦大学出版社,2015.4
书名原文:Elements of Modern X-ray Physics
ISBN 978-7-309-11269-6

I. 现… II. ①埃…②麦…③封… III. X 射线-物理学-研究 IV. 0434.14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 052406 号

Copyright © 2011 to non-English Edition held by Jens Als-Nielsen and Des McMorrow.
The original English language edition published by John Wiley and Sons, Ltd., 2011, with
copyright in the English language owned by John Wiley and Sons, Ltd..
Chinese translation rights arranged with and authorized by Jens Als-Nielsen and Des McMorrow.

上海市版权局著作权合同登记号:09-2013-229

现代 X 光物理原理

[丹]埃尔斯-尼尔森(Als-Nielsen J.) [英]麦克莫罗(McMorrow D.)著
封东来 译
责任编辑/梁 玲

复旦大学出版社有限公司出版发行
上海市国权路 579 号 邮编:200433
网址:fupnet@fudanpress.com <http://www.fudanpress.com>
门市零售:86-21-65642857 团体订购:86-21-65118853
外埠邮购:86-21-65109143
上海市崇明县裕安印刷厂

开本 787×1092 1/16 印张 20.5 字数 498 千
2015 年 4 月第 1 版第 1 次印刷

ISBN 978-7-309-11269-6/O·565
定价:89.00 元

如有印装质量问题,请向复旦大学出版社有限公司发行部调换。
版权所有 侵权必究

作者简介

Jens Als-Nielsen, 延斯·埃尔斯-尼尔森, 丹麦哥本哈根尼尔斯·玻尔研究所教授. 研究领域为中子散射和同步辐射 X 射线物理学.

Des·McMorrow, 戴斯·麦克莫罗, 英国伦敦大学学院纳米技术中心教授. 在过去 30 年里, 致力于发展和应用 X 射线技术来研究关联电子材料的基本性质.

译者简介

封东来, 复旦大学物理系教授、博士生导师. 1994 年毕业于中国科技大学近代物理系, 2001 年于美国斯坦福大学物理系获得博士学位. 从 2002 年开始在复旦大学任教至今, 现任复旦大学应用表面物理国家重点实验室主任. 多年来在国内外十余个同步辐射实验室进行过实验, 并在复旦大学讲授相关课程. 担任多个国际超导和同步辐射领域主要会议的主席、程序委员会主席、组委, 以及 *Physical Review Letters* 凝聚态物理部副编辑、《中国物理快报》副主编.

主要应用角分辨光电子能谱、X 射线弹性和非弹性散射等同步辐射实验方法, 并结合氧化物分子束外延和扫描隧道显微镜, 来研究强关联体系等复杂量子材料及其微结构. 在铜基和铁基高温超导、莫特绝缘体、电荷和磁有序材料等领域做出许多重要工作. 发表论文 100 余篇, 被引用 5000 多次. 曾获得过国家自然科学基金杰出青年基金、联合国教科文组织青年科学家奖、中国青年科技奖、海外华人物理学会亚洲成就奖、中国物理学会“叶企孙”奖、亚太物理学会联盟杨振宁奖、上海市自然科学牡丹奖、上海市自然科学一等奖等荣誉.

译者序言

本书作者 Jens Als-Nielsen 是丹麦哥本哈根尼尔斯·玻尔研究所教授, Des McMorrow 是英国伦敦大学学院纳米科技中心教授, 均为同步辐射应用专家. 他们的 *Elements of Modern X-ray Physics* (第一版) 是近年来 X 射线物理领域不可多得的一本畅销书. 作者用通俗的语言系统地介绍了 X 射线与物质的相互作用、X 射线光源、X 射线在界面的折射和反射、X 射线的散射和吸收谱以及共振散射等重要内容. 在第二版中, 又加入了现代 X 射线成像的章节. 本书抓住了 X 射线的物理本质这一关键点, 选题比较基础和系统, 配有大量的图解, 并且结合了很多现代的实验实例, 讲解十分清楚和简洁. 掌握了本书内容, 就等于掌握了现代 X 射线应用的核心, 对于物理、生物、化学、材料等领域的同步辐射用户尤其有用. 本书是 X 射线、特别是同步辐射应用领域的本科生和研究生以及科研工作者不可多得的基础参考书, 也是凝聚态物理和材料物理专业的研究生们了解 X 射线技术的一本合适教材. 通过系统的学习, 可以更加全面地了解这些实验技术, 并深入地掌握它们, 从而可以根据实际工作需要选择合适的实验技术.

译者早在 10 年前, 就阅读了本书的第一版. 后来在复旦大学讲授“散射物理”课程时, 也讲授了其中部分内容, 受到了研究生们的欢迎. 因为中国的同步辐射发展迅速, 用户群体越来越大, 因此就产生了把它翻译成中文的想法, 也得到了两位作者的支持. 当时我的同事叶令教授也参与了“光电吸收和共振散射”章节的一部分翻译工作. 但是好事多磨, 国内某出版社和 Wiley 的谈判久而未决, 而后不了了之. 到了 2012 年, 本书新出第二版之后, 两位作者主动和我联系, 他们此次保留了本书的中文版版权, 顺利和复旦大学出版社达成协议. 我于是重新开始翻译此书的第二版.

翻译此书是一项艰苦的工作, 事实上远超我的预期, 从 2013 年春节到 2014 年 4 月底, 历时 15 个月. 虽然期间科研教学繁忙, 我还是坚持了下来, 并获得了不少乐趣. 对我本人而言, 从事研究工作恰好已 20 年, 期间得到了学界前辈和同行们甚多帮助, 很是感激; 我把此书作为我回馈他们的“社区服务”, 因此尽量独立完成, 但是我同样离不开很多人在此过程中的大力帮助. 特别是我要感谢作者提供了 Latex 文件和图片, 并为中文版致辞; 感谢复旦大学出版社的梁玲编辑和戴文沁小姐的专业帮助; 感谢叶令教授提供了本书第一版部分章节的译稿; 感谢我的同事张童副研究员和学生缪瑾、沈晓萍、徐敏、叶麦、宋琦和陈鸿燕的帮助和校阅; 感谢我的家人的支持. 译者第一次进行翻译工作, 错误在所难免, 敬请读者指正.

谨以此中译本献给我的家人和帮助过我的人们.

封东来

2014 年 4 月于复旦大学

作者为中译本的致辞

We are extremely grateful to Donglai Feng for generously offering to translate our text into Chinese. It is exciting for us to see the fruits of Donglai's labours.

We very much hope that the Chinese translation of our book will be of use to the rapidly growing community of synchrotron radiation users in China.

我们非常感谢封东来慷慨地提议把我们的书翻译成中文. 我们很兴奋地看到东来的劳动成果.

我们非常希望我们的书的中译本对迅速增长的中国同步辐射用户群体有用.

Jens Als-Nielsen, Des McMorrow

2014 年 4 月

第二版序言

《现代 X 射线物理原理》面世至今已有 10 余年,深受读者的关注和喜爱,在此期间 X 光源的发展以及人们对它的应用探索取得了惊人的进步,这便鼓励了我们出版《现代 X 射线物理原理》第二版.

第二版和第一版的区别主要有以下几个方面:

1. 增加了 X 光成像的章节.
2. 原介绍动力学衍射理论的章节分为晶体和非晶体材料两个章节进行讲解,增加了诸如聚合物和生物分子等新材料,并介绍利用 X 光研究其液态和玻璃态结构.
3. 从全局的角度对多个章节进行了调整和改动.
4. 修正了排印错误.
5. 除了第 1 章之外,其余章节末都增加了习题.

在第二版的编排过程中,我们得到了许多同事和朋友的支持和鼓励,没有他们的帮助很难完成此书. 在此向他们表示最诚挚的谢意,尤其是 David Attwood, Martin Bech, Christian David, Martin Dierolf, Paul Emma, Kenneth Evans-Lutterodt, Per Hedegård, Mikael Häggström, John Hill, Moritz Hoesch, Torben Jensen, James Keeler, Ken Kelton, Carolyn Larabell, Bruno Lengeler, Anders Madsen, David Moncton, Theyencheri Narayan, Franz Pfeiffer, Harald Reichert, Ian Robinson, Jan Rogers, Joachim Stöhr, Joan Vila-Comamala, Simon Ward 以及 Tim Weitkamp.

感谢 Ib Henriksen 基金的慷慨资助,第二版的工作于 2008 年夏天在法国普罗旺斯开始进行.

本书封面的原始图片由 Michael Wulff 提供,并由 Marusa Design 公司进行设计.

谨以此书献给我们各自的家人.

Jens Als-Nielsen, Des McMorrow

2010 年 11 月于伦敦

第一版序言

20 世纪 70 年代末期第一代 X 光束线在同步辐射光源建成,预示着 X 光科学一个新时代的到来.这些年来光源技术得到了飞速的发展,人们对它的应用和认知也逐步加深.如今的第三代光源已可以产生覆盖整个 X 光波段(约 1~500 keV),并具有偏振和高能量分辨特性的高亮度光束,能够满足几乎所有的测量要求,大大推动了 X 光科学研究活动.现在许多学科的大量现象均可以用 X 射线来研究,这在同步辐射光源出现前是无法想象的.

鉴于这些发展,及时出版一本该领域的入门教科书是非常必要的.而本书的意图正是提供给读者关于 X 光的连贯性概述,不仅涵盖 X 光产生的基本物理原理、X 光与物质的相互作用,也介绍对 X 光特性的各种应用.本书主要的目标读者是本科四年级及研究生一年级学生.虽然本书是从物理学家的视角来撰写,但也希望本书能为工作在世界各地同步辐射中心的生物学家、化学家和材料学家们提供一些帮助.为使本书适用于更多人,撰写的最大挑战在于避免使用晦涩的数学推导来传达物理概念,因此书中很多复杂的数学运算和定理用方框标注以便于分开学习,书末的附录也涵盖了一些必要的物理学知识介绍.

我们同时也希望这本书能吸引更有经验的科研工作者.同步辐射中心汇聚了许许多多不同研究领域的工作小组,而不同领域想法的相互交叉往往是科学进步的驱动力.为了使这些日常工作在相邻光束线的研究小组顺利地进行互动交流,需要大家对 X 光的背景知识都有所了解,这也正是出版本书的目的.此外,许多 X 光技术现已作为标准分析的工具,如今我们不需要了解这些仪器的每个组成部分就可以进行实验.这个发展趋势虽好,但若能对 X 光原理深入了解,不仅能提高满足感,也能更好地设计实验.

本书内容源自哥本哈根大学举行多年的一个讲座课程,是一个学期的教学内容,再加上我们在大学中 X 光实验室的实践,以及在 HASYLAB 同步辐射设施一周的访问.涵盖的主题不可避免地一定程度上只局限在本专业领域,比如关于成像的主题虽然重要但涉及较少.一些在其他书本中已经详细介绍的内容,如经典结晶学等,本书就不再赘述了.尽管本书存有这些不足,我们仍希望不同背景的读者能通过本书有所收获并得到启发,从而能够利用不断发展的同步辐射技术,并发掘其更多的应用价值.

Jens Als-Nielsen, Des McMorrow

2000 年 9 月于哥本哈根

第一版致谢

本书内容源自我们在世界各地的同步辐射光源进行实验的经验总结,在此要感谢这些实验室的同事们.尤其要感谢的是 Henrik Bruus, Roger Cowley, Robert Feidenhans'l, Joseph Feldthaus, Francois Grey, Peter Gürtler, Wayne Hendrickson, Per Hedegard, John Hill, Mogens Lehmann, Les Leiserowitz, Gerd Materlik, David Moncton, Ian Robinson, Jochen Schneider, Horst Schulte-Schrepping, Sunil Sinha 和 Larc Troger,他们对本书的各个环节都提出宝贵的意见;Niels Bohr 研究所选修“X 光物理实验”的学生们,他们不仅指出初稿中不计其数的排印错误,而且也帮助完善了此书,他们的热情让我们感到教授此课程是非常有价值,有时甚至是愉快的;另外,特别要感谢 Birgitte Jacobsen 对原稿的仔细审核.最后,我们要感谢 Felix Beckmann, C. T. Chen, T. -C. Chiang, Trevor Forsyth, Watson Fuller, Malcolm McMahon, Benjamin Perman 和 Michael Wulff,他们为本书提供了工作中的实例;Keld Theodor 为本书制作了部分图片.

这本书用 Latex 进行排版,在此我们对多年来帮助开发这个系统的所有人表示感谢,特别是 Henrik Ronnow 帮助解决了一些棘手的排版问题.

封面图片承蒙在法国 Grenoble ESRF 工作的 Michael Wulff 提供.

使用指南

本书内容在编排上是循序渐进的,第 1 章给出了全书的轮廓,描述了 X 光与物质相互作用的主要机理.许多重要的概念和结论都在此章中提及,并且指出哪些内容在后续章节会有更详细的讨论和推导.我们已努力降低读懂本书所需要的数学技巧.这主要是通过把复杂的数学运算和定理放在方框中,或将其放在附录中.

现今电脑已成为使数学和物理概念更形象化的必要工具.为此,在附录中我们列出了制作本书图片的计算机程序目录,旨在简化从数学公式到计算机算法的过渡,并对设计更为复杂的数据分析程序有所帮助.本书所用程序是在 MATLAB®编程环境下完成的,但其从数学演绎而来的过程很透明,因此也能方便地转换为其他语言.程序列表所对应的图片在书中用“★”表示.

目录

译者序言	1
作者为中译本的致辞	1
第二版序言	1
第一版序言	1
第一版致谢	1
使用指南	1
1 X 射线及其与物质相互作用	1
1.1 X 射线:波和光子	2
1.2 散射	4
1.2.1 单个电子	4
1.2.2 单个原子	7
1.2.3 单个分子	9
1.2.4 晶体	9
1.2.5 一个自由电子的康普顿散射	11
1.3 吸收	13
1.4 折射和反射	16
1.5 相干性	17
1.6 磁相互作用	18
1.7 深入阅读材料	19
2 X 光源	20
2.1 早期的历史和 X 光管	20
2.1.1 X 光源的早期历史	20
2.1.2 标准的 X 光管和旋转阳极 X 光源	20
2.2 同步辐射介绍	21
2.2.1 同步辐射	21
2.2.2 X 光束的特征:亮度	22
2.3 从圆弧轨道发出的同步辐射	22
2.3.1 多普勒效应和同步辐射的自然张角	24
2.3.2 同步辐射的特征频率	26
2.3.3 辐射通量,功率和频谱	26
2.3.4 举例:ESRF 的弯铁辐射	28
2.3.5 小结:弯铁辐射	29

2.4	波荡器的辐射	29
2.4.1	波荡器的参数	30
2.4.2	本征波长 λ_1	30
2.4.3	高次谐波	31
2.4.4	单色度和角度准直度	33
2.4.5	螺旋型波荡器	37
2.4.6	发射度和衍射极限	37
2.4.7	波荡器亮度	39
2.4.8	总结:波荡器辐射	39
2.5	扭摆器辐射	40
2.6	自由电子激光	41
2.7	紧凑型光源	42
2.8	相干体积和光子简并度	44
2.9	深入阅读材料	45
2.10	习题	45
3	界面的折射和反射	47
3.1	折射,散射过程中的相移	48
3.2	折射率和散射长度密度	49
3.3	包含吸收的折射率	52
3.4	X 射线区的斯涅耳定律和菲涅耳等式	53
3.5	均匀平板的反射	56
3.6	多层膜的镜面反射	58
3.6.1	运动学近似	59
3.6.2	Parratt 严格迭代方法	60
3.7	有梯度界面的反射率	61
3.8	粗糙界面和表面	62
3.8.1	菲涅耳反射率的极限情况	64
3.8.2	无关联的表面	64
3.8.3	关联表面	65
3.9	反射率研究举例	67
3.9.1	朗缪尔膜	67
3.9.2	液晶的自由表面	68
3.10	X 射线光学	71
3.10.1	X 光折射光学	71
3.10.2	曲面镜	74
3.11	深入阅读材料	76
3.12	习题	76

4 运动学散射 I: 非晶态材料	78
4.1 两电子体系	78
4.1.1 两电子体系	78
4.1.2 方向平均	80
4.2 一个原子的散射	82
4.2.1 弹性散射和原子形状因子	82
4.2.2 非弹性散射	84
4.3 一个分子的散射	86
4.4 液体和玻璃体的散射	87
4.4.1 径向分布函数	88
4.4.2 液体的结构因子	89
4.4.3 过冷液体的结构	91
4.5 小角 X 光散射(SAXS)	94
4.5.1 孤立颗粒的形状因子	95
4.5.2 长波极限: Guinier 分析	96
4.5.3 短波极限: Porod 分析	98
4.5.4 形状因子随颗粒形状的变化	98
4.5.5 多分散性	100
4.5.6 颗粒间相互作用	100
4.5.7 胶束到囊泡转变的动力学	101
4.6 深入阅读材料	103
4.7 习题	103
5 运动学散射 II: 晶体序	105
5.1 晶体的散射	105
5.1.1 晶体结构: 晶格和基元	105
5.1.2 散射振幅的分解	108
5.1.3 劳厄条件	109
5.1.4 倒格子	110
5.1.5 劳厄和布拉格条件的等价性	111
5.1.6 一维、二维和三维中的对晶格求和	113
5.1.7 晶胞结构因子	114
5.1.8 Ewald 球面	115
5.2 准周期结构	117
5.2.1 被非公度调制的晶体	118
5.2.2 准晶	119
5.3 晶体截断棒	121
5.4 晶格振动, 德拜-沃勒因子和 TDS	123
5.5 小晶粒的散射强度	128
5.5.1 洛伦兹因子	130

5.5.2	消光	131
5.5.3	吸收效应:延展面几何设置	132
5.5.4	二维下的洛伦兹因子	133
5.6	运动学散射的应用	134
5.6.1	粉末衍射	134
5.6.2	纤维的衍射	136
5.6.3	二维晶体学	141
5.7	深入阅读材料	145
5.8	习题	145
6	完美晶体的衍射	148
6.1	单原子层:反射和透射	149
6.2	少数层原子的运动学反射	150
6.3	达尔文理论和动力学衍射	152
6.3.1	基本差分方程	152
6.3.2	分离 T 场和 S 场	153
6.3.3	T 场和 S 场的尝试解	153
6.3.4	振幅反射率, S_0/T_0	154
6.4	达尔文反射率曲线	155
6.4.1	达尔文宽度	156
6.4.2	消光深度	157
6.4.3	积分强度	159
6.4.4	驻波	160
6.4.5	高阶反射	162
6.4.6	吸收效应	163
6.4.7	非对称式布拉格构型	164
6.5	杜蒙德图	165
6.5.1	一块晶体	166
6.5.2	以对称式布拉格构型排布的两块晶体	169
6.6	深入阅读材料	170
6.7	习题	171
7	光电吸收	172
7.1	孤立原子的 X 射线吸收	174
7.1.1	自由电子近似	175
7.1.2	优于自由电子近似的方法	178
7.2	EXAFS 和近边结构	181
7.2.1	实验考虑	181
7.2.2	理论概述	184
7.2.3	实例: CdTe 纳米晶体	185

7.3	X 射线二向色性	189
7.4	角分辨光电子能谱	194
7.5	深入阅读材料	197
7.6	习题	197
8	共振散射	199
8.1	强迫的带电振子	201
8.1.1	色散修正:实部和虚部	201
8.1.2	总散射截面	202
8.1.3	色散修正与折射率	203
8.1.4	吸收截面	204
8.2	原子作为振子的一个集合	204
8.3	Kramers-Kronig 关系	205
8.4	对 f' 的数值估算	206
8.4.1	简单模型	206
8.4.2	更实际的方法	208
8.5	Friedel 定律的失效和 Bijvoet 对	210
8.5.1	实例:ZnS 中的绝对极化方向	212
8.5.2	手性晶体的 Bijvoet 实验	212
8.6	晶体学中的相位问题	214
8.6.1	MAD 方法	215
8.7	量子力学描述	216
8.8	深入阅读材料	219
8.9	习题	219
9	X 光成像	221
9.1	X 光成像简介	221
9.2	吸收衬度成像	223
9.2.1	造影和断层成像术	223
9.2.2	显微术	226
9.2.3	举例:X 射线透射显微术	229
9.3	相衬成像	230
9.3.1	自由空间传播	231
9.3.2	光栅干涉法	235
9.4	相干散射成像	239
9.4.1	相干光束和散斑图案	239
9.4.2	通过过采样获取相位	241
9.4.3	举例:金的纳米颗粒成像	244
9.5	全息照相术	245
9.6	深入阅读材料	246

9.7 习题	248
附录	250
附录 A 散射与吸收截面	250
附录 B 经典电偶极辐射	254
附录 C 电磁场量子化	258
附录 D 高斯统计	262
附录 E 傅立叶变换	264
附录 F X 射线与中子的比较	270
附录 G MATLAB® 计算机程序	272
附录 H 习题答案及提示	294
 参考文献	 299
索引	301
符号表	305
物理常数表	307

X 射线及其与物质相互作用

X 射线是在 1895 年被伦琴(Wilhelm Conrad Röntgen)所发现. 从那时起, X 射线逐步发展成为探测物质结构的极重要的工具. 数不胜数的材料结构由 X 射线解析得出, 包括从简单的化合物到非常复杂和著名的 DNA 双螺旋. 近年来, 解析蛋白质的结构甚至生物活体功能单元的结构, 都已经成为平常的事情. 从 X 射线的发现一直到 20 世纪 70 年代中期, 人们对 X 射线与物质相互作用的理论理解, 以及运用 X 射线的知识, 一直在稳步增长. 这个时期技术上的主要限制是 X 光源. 因为从 1912 年起, 它就基本上没有改变. 直到 1970 年代, 人们意识到在为高能物理和核物理建造的储存环(storage ring)中、高速旋转的带电粒子所发出的同步辐射(synchrotron radiation)可能成为更强、更加多用途的 X 光源. 事实也确实如此, 同步辐射光源是如此之好, 以致目前世界上已经建成许许多多的、专用于产生 X 光的同步辐射储存环.

目前同步辐射 X 光源已经发展到所谓的第三代同步辐射光源, 如图 1.1 所示, 它比最初的实验室 X 光源强了大约 10^{12} 倍. 随着同步辐射光源的出现, X 光科学的创新步伐大大提速(虽然可能不是以万亿倍!), 而时至今日也没有放缓的迹象. 目前第一个 X 光自由电子激光源已投入运行^①, 当它们开始全面运行时, 无疑将会出现更多的重要突破. 在第 2 章中我们将解释 X 光源的基本物理原理, 概述它们的主要特点.

我们在图 1.2 中展示了第三代同步辐射光源上一个典型实验光束键的关键组成部分. 其中主要的部件可能会以不同的形式出现在不同的光束键上, 具体的细节自然要随着实际应用需求而改变. 首先我们来看看光源, 这里电子并不是简单地进行圆周运动, 而是穿过一个由多块磁铁构成的直线节(即波荡器), 这样电子就会被迫进行小幅振荡. 每一次的振荡中都会辐射 X 射线. 虽然振荡的幅度不大, 但所有经过的电子发出的辐射相干相加后会发出非常强的 X 光束. 第二个重要部件是单色器. 在许多应用中, 单色器被要求工作在某个平均波

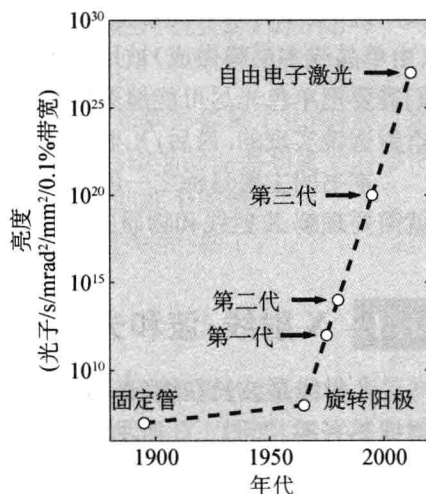


图 1.1 X 光源的亮度(brightness)演化历史. 光源亮度将在第 2 章中给予定义和讨论, 同步辐射和自由电子激光产生 X 射线的原理也将一并介绍. 对于自由电子激光, 我们使用其平均亮度的数据. 因为自由电子激光的 X 光脉冲极短, 仅仅是 100 fs 量级, 其峰值亮度远超其平均亮度.

① 译者注: 此处指 2011 年时.