

科學圖書大庫

繞射物理學

原作者 J. M. Cowley

主譯者 國立編譯館

譯者 徐 統

徐氏基金會出版

科學圖書大庫

繞射物理學

原作者 J. M. Cowley

主譯者 國立編譯館
譯者 徐 統

徐氏基金會出版

財團法人 徐氏基金會

科學圖書大庫

版權所有

不許翻印

中華民國七十八年四月十二日再版

繞射物理學

基本定價 4.40

譯作權所有人 國立編譯館
譯者 徐統 美國亞利桑那州立大學物理博士

本書如發現裝訂錯誤或缺頁情形時，敬請「刷掛」寄回調換。謝謝 惠顧

局版臺業字第3033號

出版者 財團法人 徐氏基金會 臺北市郵政信箱13-306號
郵政劃撥帳戶第00157952號 電話：3615795～8

發行人 呂玄非 新店市中正路284巷7號

承印廠 太原彩色印製有限公司 台北市武成街35巷9號

初版序

這本書是從十年來對大學高年級和研究生開的物理光學、繞射物理學和電子顯微鏡的講義整理出來的。書中反映了我個人對電子繞射和無序、非完美晶體繞射的特殊興趣，採用了對處理這些問題特別有效的方法，一開頭就用富里葉轉換，而不把它當作富里葉級數的推廣。這種方法不但在觀念上和理論基礎上比較合適，而且能統一處理所有的繞射問題：電子的、X射線的，和中子的。

由於採用了這種方法，需要較長的篇幅才能詳細推論到常見的固體繞射現象。布拉格定律到第六章才出現，而且是當作厄瓦球作圖法的推論。這對於不熟悉傳統論述法的讀者，可能造成困難。因此，這本書可能比較適於已經修過一門較淺的繞射課程的學生，和已經有些繞射工作經驗的人。

書中關於電子繞射的部份，大部份是和澳大利亞C.S.I.R.O.化學物理系A.F.Moodie合作的成果，他是我繞射理論方面多年的導師。我衷心感謝C.S.I.R.O.，墨爾本大學，和阿利桑那州立大學的同事。他們幫助我完成本書，也允許我在書中引用他們的成果和圖片。我也感謝Kato、Borrmann和Beauvillain諸先生允許我採用圖9-10、14-4和14-5。

John M. Cowley

二版序

我的學生和許多其他的人幫我找出了初版中的許多錯誤。翻譯俄文版的Z.G. Pinsker教授和他的同事提出了有用的評論。我向他們表示謝意，我也感謝和我討論過某些增加的章節的Peter Goodman博士。

大部份的改動是在最後幾章，關於繞射方法的應用，因為這方面的進步最大。事實上，這方面的知識增加太快，許多新近的研究都不是這本書的篇幅所能涵蓋的。不過，書中提到這些題目，也開列了參考文獻，希望能引導讀者去查考出較完整的說明。

John M. Cowley

目 錄

初版序.....	I
二版序.....	II
第一部 物理光學	1
第一章 佛瑞奈與佛勞恩和非繞射	3
1-1 前 言.....	3
1-2 波方程式與波.....	5
1-3 疊加與相干.....	9
1-4 惠更斯原理.....	11
1-5 由散射理論著手.....	13
1-6 倒易性.....	16
1-7 佛瑞奈繞射.....	17
1-8 佛勞恩和非繞射.....	22
習 題.....	25

第二章	富里葉轉換與卷積	26
2-1	導 論	26
2-2	富里葉轉換—通論	31
2-3	富里葉轉換與繞射舉例	37
	習 題	53
第三章	成像與繞射	55
3-1	成像的波動理論	55
3-2	阿貝理論	59
3-3	小角度近似	61
3-4	相位對比	64
3-5	多組件系統	69
	習 題	71
第二部	運動學繞射	73
第四章	各種輻射和它們被物質的散射	75
4-1	X射線	75
4-2	電 子	80
4-3	中 子	87
	習 題	90
第五章	從原子組的散射	92
5-1	運動學的近似法	92
5-2	實空間和倒易空間	94

5-3	一般帕特森函數	97
5-4	相關函數舉例	100
5-5	時空的相關	104
5-6	繞射幾何與強度	112
5-7	實際的考慮	115
5-8	截面與投影	118
	習題	120

第六章 晶體的繞射 121

6-1	理想的晶體	121
6-2	繞射幾何	124
6-3	晶體結構分析	130
6-4	結構分析方法	132
6-5	中子散射結構分析	136
6-6	由電子繞射分析結構	139
	習題	140

第七章 非完美晶體的繞射 142

7-1	繞射問題的闡述	142
7-2	帕特森函數法	145
7-3	平均格子的偏差	147
7-4	非完美而沒有平均結構的晶體	155
	習題	160

第三部 動力學散射	163
第八章 完美晶體的繞射	165
8-1 多次相干散射	165
8-2 理論基礎	166
8-3 貝特理論	168
8-4 二束近似法	173
8-5 勞厄(穿透)型	176
8-6 貝特位勢	181
8-7 布拉格型	183
第九章 動力繞射效應	186
9-1 厚度條紋和轉動曲線—電子繞射	186
9-2 X射線與中子繞射的動力學效應	196
9-3 波爾曼效應	201
習 題	203
第十章 多束理論	204
10-1 動力學多束繞射	204
10-2 貝特理論的推廣—穿透型	206
10-3 達爾文式的推導法	216
10-4 特例—波束約減	218
10-5 計算方法	220
10-6 柱體近似法	223
習 題	225

第十一章	由“物理光學”著手·····	226
11-1	電子在晶體內的傳播·····	226
11-2	多次散射級數·····	233
11-3	一般的雙連加解·····	237
11-4	計算方法·····	240
11-5	非週期性物體的繞射強度·····	245
	習題·····	247
第四部	應用·····	249
第十二章	漫散射和吸收效應·····	251
12-1	熱漫散射·····	251
12-2	原子靜位移·····	257
12-3	電子激發·····	264
12-4	漫散射中的動力學效應·····	269
12-5	吸收效應·····	274
第十三章	電子顯微像·····	281
13-1	電子顯微鏡的光學·····	281
13-2	成 像·····	285
13-3	薄樣品的對比·····	286
13-4	晶體結構的像·····	294
13-5	高壓電子顯微鏡·····	306
	習題·····	308

第十四章	K線花樣效應·····	309
14-1	柯瑟爾線·····	309
14-2	菊池線·····	315
14-3	外在的發散輻射·····	318
14-4	K線所含的資料·····	320
14-5	通 道·····	323
14-6	二次輻射·····	325
第十五章	動力學效應在單晶上的應用·····	327
15-1	晶體參數對動力學效應的影響·····	327
15-2	X射線干涉儀·····	328
15-3	多束和雙束動力學繞射·····	329
15-4	從厚度條紋求結構波幅·····	333
15-5	從轉動曲線求結構波幅·····	335
15-6	相對論效應·····	338
15-7	吸收和溫度效應·····	340
15-8	決定晶體的對稱性·····	340
第十六章	鑲嵌晶體和多晶材料·····	345
16-1	一般說明·····	345
16-2	鑲嵌晶體·····	346
16-3	多晶材料·····	350
第十七章	原子在晶體中的序列·····	358
17-1	無序狀態的性質和描述·····	358

17-2	序列參數·····	360
17-3	帕特森函數·····	363
17-4	大小效應·····	364
17-5	運動學繞射·····	366
17-6	和序列能量的關係·····	374
17-7	無序晶體的動力學散射·····	376
17-8	異相嚙·····	379
	習 題·····	384
第十八章 延展的缺陷·····		385
18-1	序 論·····	385
18-2	層錯—統計的、運動學的理論·····	386
18-3	層錯的動力學繞射·····	396
18-4	差 排·····	399
參考文獻·····		406

第一部 物理光學

第一章 佛瑞奈與佛勞恩和非繞射

1-1 前 言

要用一個整體的理論來解釋X射線、電子、中子繞射，並討論到電子顯微鏡和其他繞射成像技術時，很難把許多為特殊需要而發展的理論連成一氣。實驗家常用的理論往往並不是理論家嚴格推導的簡化，而是在基本觀念上比較直覺，用的數學比較簡單，也比較容易圖解。幾何光學就是一個例子。

在本書中，我們希望盡量少用數學，而為實驗家們做個連貫的理論性說明。我們希望能為實驗家與理論家，用一個通用的理論，來串連各種不同的輻射，和不同的物質所產生的不同的物理現象，因而了解一類問題之後就能應用到別類問題上。

對絕大多數的X射線繞射與晶體結構分析工作者來說，繞射包括了佛勞恩和非繞射理論的三維推廣、理想化的無限大的週期物體、確定的繞射線方向，和加權的倒格子。基本的數學工具是富里葉級數。當晶體不是無限大也不是完美的時候，就要應用富里葉轉換，以處理同樣的單散射及運動學的近似算法。

這個理論跟厄瓦 [Ewald 1916] 或勞厄 [Laue 1931] 處理X射線繞射的理論大不相同，甚至跟 [Darwin 1914] 的直觀而簡單的算法也不一樣。但是我們必須靠他們幾位的成果來考驗較簡單實用理論

的適用範圍。同時，要了解比較新的技術如X射線表面圖、X射線干涉儀，以及較老的柯瑟爾線方法等等，其所用的基本繞射理論是一樣的，只是在各個實驗上作了不同的簡化而已。

中子繞射最初是核物理學家從微分散射截面而不是原子散射振幅的觀念出發的。後來分為兩途：結構分析者把X射線繞射的觀念搬進來，而固態物理學者則用 $\mathbf{k}$ 向量、布里淵區等等來說明他們的實驗。為了研究較複雜的包含非彈性散射的隨著時變的過程（包括聲子和磁子），固態物理學的方法得以加工琢磨，而來自X射線繞射的富里葉轉換術則未能發展。

電子繞射與X射線繞射的發展有兩點相同：盡可能地用佛勞恩和菲的簡單運動學的近似法，有必要時則採用與勞厄的X射線理論相似的貝特[Bethe 1928]的動力學理論。它和X射線不同的地方，在於動力學的散射效應比較重要也比較複雜。因而有幾種簡化的近似法應實驗需要而產生。

電子繞射還有一種困難，就是由散射理論推算原子散射因數。這是原子和原子核物理學家的專長，因此也充滿他們的專門術語。他們處理電子被氣體繞射時一向把原子散射因子（以 $\text{\AA}$ 為單位）看成 $s = 4\pi\lambda^{-1}\sin\theta$ 的函數。可是在X-射線繞射和電子被固體繞射時，一向用 $\lambda^{-1}\sin\theta$ 或倒格子間隔 $u = 2\lambda^{-1}\sin\theta$ 。

電子顯微成像的理論自然可以從光學顯微鏡推得，但必須加上電子受樣品散射或繞射的理論。這兩方面可以用富里葉轉換一併處理，因為它是電子和X射線繞射基本的運動學簡化式，同時也是Duffieux晚近的[1946]成像理論的基礎。

動力學的X射線和電子繞射理論導出的是微分方程式，而不是富里葉轉換中的積分形式。這點分別顯然把一個統一的理論分為兩半，原理上相通，但實用上絕不相同。好在此缺陷已能填補，方法是用富里葉轉

換爲主的積分形式的動力學繞射理論。

了解了這一點，我們講述繞射就從複習物理光學開始，接者介紹繞射、散射和成像，使用的工具是富里葉轉換和相關的重要積分式一卷積。

如果我們就此對繞射作全盤處理，可能難以被許多實用電子顯微鏡及繞射工作者接受。因此我們在適當的地方與較熟悉的微分方程式法作一比較。然而讀者應了解這只是與主流平行的支流，講述它的目的在於適應傳統和幫助了解。

爲了容易了解，我們在推理和數學上的簡省可能會引起純理學者的批評。在許多地方我們用語文重述數學式子，這樣雖較不精確，但或許有助於不擅數學的讀者。

開講之前，我們假定讀者已熟於用複數表示波函數，用富里葉級數表示週期函數和微分、積分的大要。若是沒有這些基礎，我們建議參看物理光學的書，如Ditchburn [1976]或Nussbaum與Philips [1976]。比較高深的上好論著則推S. G. Lipson與H. Lipson [1969]和Goodman [1968]。

1-2 波方程式與波

1-2-1 波函數

爲求得繞射束的強度，我們用通用的波函數爲工具。但是不論電磁輻射還是粒子束的波動，都是不能直接觀察的。波函數一以空間坐標爲變數的複函數 $\Psi(\mathbf{r})$ ，只是個方便的數學工具。我們可以由它求出可度量的物理量——強度，或能量的轉移，以 $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ 表示。如果用水波、繩波作比喻，我們可以看到波函數而領會波長 λ ，波向量 $\mathbf{k}$ （其方向指向波的行進方向、大小爲 $2\pi/\lambda$ ）、頻率 ν 或角頻率 ω 、相速 v 、和群速等觀念。