

# X射线的发现及其早期研究

王春燕 王福合

(首都师范大学物理系 100048)

1895年X射线的发现标志着现代物理学的诞生，X射线发现后，包括伦琴在内的很多科学家都兴趣盎然地投身于X射线本质的研究。X射线的发现及其研究，为物理、化学、生物学、医学、天文学等学科的发展提供了革命性的手段和广阔的前景，也为相关学科造就了数十名诺贝尔奖获得者。尤其在物理学领域，物理学家们对于X射线的研究推动了物理学自身的发展。本文回顾X射线的发现，以及X射线晶体衍射现象和X射线晶体学的研究，以纪念它具有特殊的重要意义。

## 一、X射线的发现

X射线的发现源于阴极射线的研究。19世纪末，许多科学家都在研究阴极射线，1891年，德国物理学家赫兹(H. Hertz, 1857~1894)发现阴极射线可穿透放电管内的金属箔片，1893年，赫兹的学生勒纳德(P. Lenard, 1862~1947)继续研究，试图将阴极射线引出放电管外，以便于研究射线的性质，因此他将放电管壁上正对阴极的地方制作一个铝制的小窗口。他发现，阴极射线在大气中的射程只有几厘米。而伦琴相信，

一定还有一些问题需要解决，并于1895年10月开始研究阴极射线。

在开始一个新的课题前，伦琴总要先重复别人的工作。11月8日晚，伦琴为了避免环境光的影响，他用黑纸把放电管包严，在完全遮光的暗室内进行实验。他用一张涂有氰亚铂酸钡的纸板作为荧光屏，他利用比勒纳德更高的电压和真空度，看看阴极射线是否能射入空气更远些。当放电管加上大电压时，他发现，在黑暗中距离放电管约1米处的荧光屏发出微弱的闪光。断开电源，闪光消逝；再次加上电压，闪光重现；他把纸屏移至两米多远或把纸屏翻过来仍有荧光出现。

射线可透过铝制窗口达一米多远的荧光屏产生荧光，实际上阴极射线打在铝制的小窗口出来的就是X射线，有人将此射线称为“勒纳德射线”，但是勒纳德并没有深入研究，由此错过了X射线的发现。伦琴继续阴极射线的研究，才有了新的发现。

伦琴意识到，新的射线不应是阴极射线，因为阴极射线是不能透过黑纸板，而且在空气中的射程只有几厘米。对此，他废寝忘食地不断重复，最后发现，新的射线可以直线传播，遇到障碍物既不反射，也不折射，在外界磁场下也不偏转；射线具有非常强的穿透本领，能透过上千页的书，甚至几毫米厚的铝板，但不能透过几毫米厚的铅板。他还发现，这种射线能透过手掌而在荧光屏上显现出手指骨的轮廓，于是12月22日，他用这种射线给他夫人的手拍了一张照片(如图2所示)，其指骨清晰，甚至结婚戒指也清晰显露出来。这就是伦琴公开的第一张X射线照片！据说，他的妻子看到这张照片时吓了一跳，她称该射线为“死亡的征兆”。虽然话有些夸张，但伦琴却因X射线的发现获得了1901年诺贝尔物理学奖。这是第一个获得诺贝尔物理学奖的科学家。



图1 伦琴(Wilhelm Röntgen, 1845~1923)



图2 第一张 X 射线照片——伦琴夫人手指 X 射线照片

1895 年 12 月 28 日他发表了关于新射线的论文。他称这种本质尚不清楚的新射线为 X 射线。1896 年 1 月 5 日，维也纳《新闻报》报道了伦琴发现 X 射线的消息，并引起了轰动。1 月 23 日，伦琴在维尔茨堡大学物理研究所作了关于 X 射线的第一次报告。他还邀请维尔茨堡大学解剖学教授克利克尔，用 X 射线拍摄了克利克尔一只手的照片。克利克尔教授带头祝贺，当即建议把这种射线命名为伦琴射线。

## 二、X 射线本质的探索

X 射线是高速运动的电子与物体碰撞时产生的一种电磁波。伦琴发现的新射线，因为并不清楚它的性质，在当时科学界引起极大的争论，且对新射线本质的认识主要分为两种看法：一些人认为，X 射线是一些带电粒子，其主要支持者是英国物理学家布拉格 (W. Bragg)(见图 3)；另一些人认为，X 射线是具有偏振性的横波，其主要支持者是英国物理学家巴克拉 (C. Barkla)(见图 4)。这场争论并未得到明确的结论，

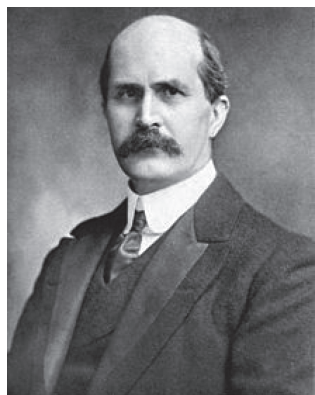


图3 布拉格 (William Henry Bragg, 1862-1942)



图4 巴克拉 (Charles Glover Barkla, 1877~1944)

但还是在科学界产生了一定的影响。

首先讨论 X 射线的粒子性。布拉格根据  $\gamma$  射线能使原子电离，在电场和磁场中不受偏转以及穿透力极强等事实，主张  $\gamma$  射线是由中性偶——电子和正电荷组成。布拉格认为，X 射线也一样，并由此解释了当时已知的各种 X 射线现象。

然后讨论 X 射线的波动性。1906 年，英国物理学家巴克拉利用 X 射线经两个散射物的二次辐射强度的分布，证明 X 射线具有偏振性。图 5 给出了检验 X 射线偏振特性的实验示意图，当 X 射线以  $45^\circ$  的入射角照射到第一散射体上，将会产生沿  $x$  方向出射的二次辐射 X 射线，该二次辐射的 X 射线再照射到第二散射体上时分别沿不同方向观察二次辐射的 X 射线强度，巴克拉发现，在  $z$  方向上观察到 X 射线最强，而在  $y$  方向上观察不到 X 射线，这就证明 X 射线具有偏振性。也就是说，X 射线是电磁波，为横波，即振动方向与传播方向垂直。根据 X 射线的偏振性，说明 X 射线和普通光是类似的。巴克拉关于 X 射线的偏振实验和波动性观点可以说是后来劳厄发现 X 射线衍射的前奏。

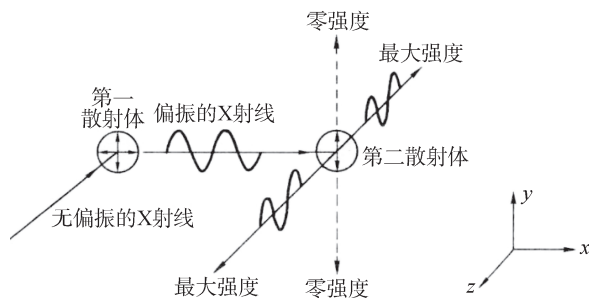


图5 X 射线偏振实验示意图

要想确定 X 射线是否具有波动性，人们自然想到利用光学中的衍射光栅来观察 X 射线的衍射现象。可要想观察到 X 射线的衍射，则衍射光栅的光栅常数（即光栅上每个透光和不透光周期单元的长度）则需与 X 射线的波长在同样的数量级。当时最密的人工衍射光栅，仅适用于一般可见光线。由 X 射线的穿透力得知，若 X 射线是波，估计其波长要短得多——约为可见光波长的千分之一。从技术上讲，制作如此精细的光栅是完全不可能的。

大约在 1912 年 1 月底，德国物理学家索末菲 (A. Sommerfeld, 1868~1951) 的一位学生厄瓦尔德 (P. Ewald) 在准备博士论文过程中，为研究光波在晶格中的行为而寻找数学处理方法时遇到了一些困难，为此他向劳厄 (M. Laue) (见图 6) 请教。在他们的探讨中劳厄了解到晶体中原子间的距离很小，与可见光的波长相比大概只有波长的 1/500 或 1/1000。劳厄想到，虽然人工做不出这样细的光栅，但自然界中的晶体也许能行。晶体是一种几何形状整齐的固体，而在固体平面之间有特定的角度，并且有特定的对称性。这种规律是构成晶体结构的原子有次序地排列的结果。一层原子和另一层原子之间的距离大约是 X 射线波长的大小。如果这样，晶体应能使 X 射线衍射。劳厄酝酿出一个实验：把晶体当作一个三维光栅，让一束 X 射线穿过，由于空间光栅的间距与 X 射线波长的估计值在数量级上近似，可期望观察到衍射谱。虽然劳厄的想法受到索末菲和维恩 (W. Wien) 等著名物理学家的怀疑，但是在索末菲的助手弗里德里希 (W. Friedrich) 和伦琴的博士研究生克尼平 (P. Knipping) 的支持和参与下，他们终于成功地观察到 X 射线透过硫酸铜后的



图 6 劳厄 (Max von Laue, 1879~1960)

衍射斑点。通过改进仪器设备数周后他们照出更为清晰的 ZnS、PbS 和 NaCl 等晶体的 X 射线衍射图 (如图 7 所示)。

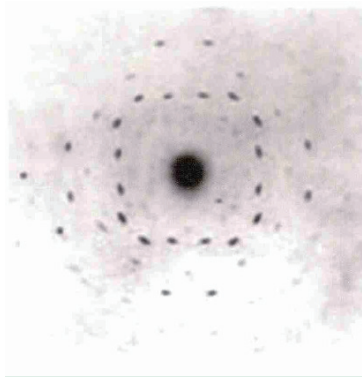


图 7 ZnS 晶体的 X 射线衍射图

在实验上观测到晶体的衍射花样之后，劳厄就面临着理论解释的问题。实际所要求的就是将物理光学中的一维光栅理论公式，推广到三维。

这里先讨论一维光栅，如图 8 所示，当光入射到光栅常数为  $a$  的一维光栅时，光将发生衍射。形成衍射极大 (即亮条纹) 的条件是光程差为波长的整数倍。由图 8 可知相邻衍射光线的光程差为距离为  $BC-AD$ ，由此可得一维光栅衍射的理论公式：

$$a(\cos\alpha_0 - \cos\alpha) = h\lambda, \quad (1)$$

满足 (1) 的光将形成亮条纹，这些衍射光在整个空间形成如图 8 所示的圆锥。

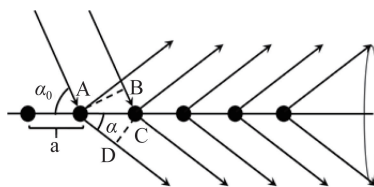


图 8 一维光栅的衍射条件示意图

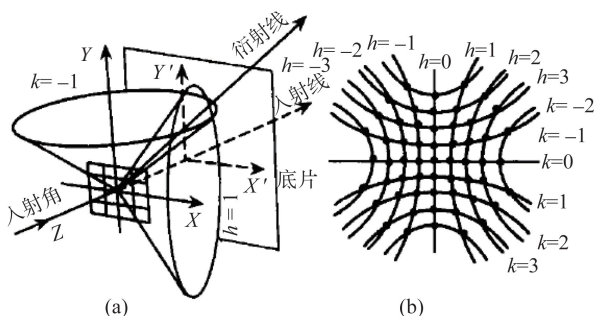


图 9 二维光栅的衍射锥面 (a) 及其衍射谱 (b)

类推可得到二维光栅形成明亮条纹的条件:

$$\begin{cases} a(\cos\alpha_0 - \cos\alpha) = h\lambda, \\ b(\cos\beta_0 - \cos\beta) = k\lambda. \end{cases} \quad (2)$$

如图 9 所示, 此时形成亮斑的条件是两个满足公式 (2) 的那些圆锥面的交点 (如图 9(b) 所示)。

再类推可得到三维光栅, 此时形成明亮条纹的条件:

$$\begin{cases} a(\cos\alpha_0 - \cos\alpha) = h\lambda, \\ b(\cos\beta_0 - \cos\beta) = k\lambda, \\ c(\cos\gamma_0 - \cos\gamma) = l\lambda. \end{cases} \quad (3)$$

如图 10 所示, 此时形成亮斑的条件是三个满足公式 (3) 的那些三个方向上圆锥面的交线。(3) 式即为描述晶体 X 射线衍射的劳厄方程。式中  $a, b, c$  分别为三维光栅在三个方向的间距,  $\alpha, \beta, \gamma$  分别为 X 射线在三个方向的出射角。

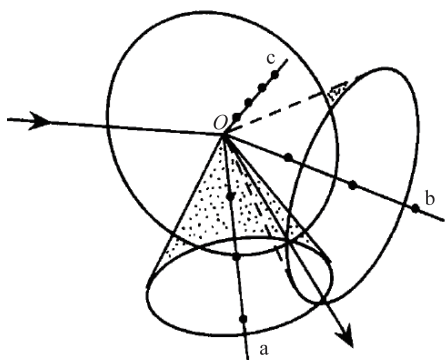


图 10 三维光栅的衍射条件示意图

劳厄发现 X 射线衍射有两个重大意义。一方面它表明了 X 射线是一种波, 对 X 射线的认识迈出了关键的一步, 这样科学家就可以确定它们的波长, 并制作仪器对不同的波长加以分辨 (与可见光一样, X 射线具有不同的波长); 另一方面是它第一次对晶体的空间点阵假说作出了实验验证, 使晶体物理学发生了质的飞跃。一旦获得了波长一定的光束, 研究人员就能利用 X 射线来研究晶体光栅的空间排列, X 射线晶体学成为在原子水平研究三维物质结构的重要条件。此后, X 射线学在理论和实验方法上飞速发展, 形成了一门内容极其丰富、应用极其广泛的综合学科。由于劳厄出色的发现, 1914 年他获得了诺贝尔物理学奖。

### 三、晶体衍射的研究

劳厄的研究结论引起了英国布拉格父子的关注, 当时老布拉格, 即亨利·布拉格已是利兹大学的物理学教授, 而小布拉格, 即劳伦斯·布拉格 (W. L. Bragg) (见图 11) 刚从剑桥大学毕业, 在卡文迪什实验室工作。这父子俩都坚持 X 射线微粒观点, 并试图用 X 射线的微粒理论来解释劳厄的照片, 但他们的尝试未能取得成功。小布拉格经过反复研究, 以更简洁的方式解释了 X 射线晶体衍射的形成, 并提出著名的布拉格衍射公式:

$$2d\sin\theta = n\lambda. \quad (4)$$

事实上布拉格公式可以利用图 12 所示的光程差满足波长的整数倍即可得到。

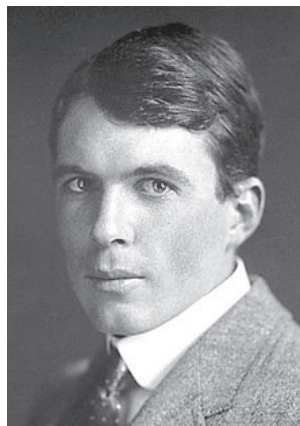


图 11 劳伦斯·布拉格 (William Lawrence Bragg, 1890~1971)

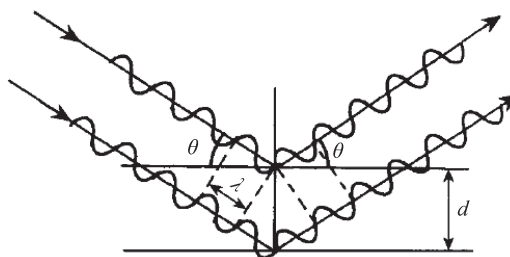


图 12 布拉格衍射示意图

1912 年 11 月, 小布拉格以《晶体对短波长电磁波衍射》为题向剑桥哲学学会报告了上述研究结果。老布拉格于 1913 年 1 月设计出第一台 X 射线光谱仪, 并利用这台仪器, 发现了特征 X 射线。

小布拉格在用特征 X 射线分析了一些碱金属卤化物的晶体结构之后, 与其父亲合作, 成功地测定出

了金刚石的晶体结构，并用劳厄法进行了验证。金刚石结构的测定完美地说明了化学家长期以来认为的碳原子的四个键按正四面体形状排列的结论（如图 13 所示）。这对尚处于新生阶段的 X 射线晶体学来说非常重要，充分显示了 X 射线衍射用于分析晶体结构的有效性，使其开始为物理学家和化学家普遍接受。布拉格父子因在用 X 射线研究晶体结构方面所做出的杰出贡献分享了 1915 年的诺贝尔物理学奖。值得一提的是，尽管老布拉格最初认定 X 射线是穿透性很强的中性微粒，反对波动的观点，但随着科学的发展，布拉格不仅接受波动观点，而且也做出了杰出的贡献。

1916 年，美籍荷兰物理学家、化学家德拜 (P. Debye, 1884~1966) 和瑞士物理学家谢乐 (P. Scherrer, 1890~1969) 发展了用 X 射线研究晶体结构的方法，采用粉末状的晶体代替较难制备的大块晶体。

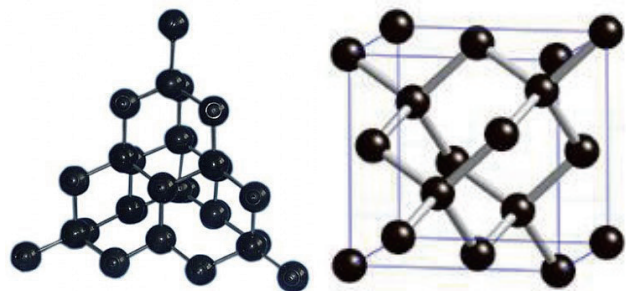


图 13 金刚石原子结构图

德拜粉末法可用于鉴定样品的成分，测定晶体结构。德拜因利用偶极矩、X 射线和电子衍射法测定分子结构的成就而获 1936 年诺贝尔化学奖。

从物理原理上讲，上述三种 X 射线衍射的基本原理都可以用布拉格衍射公式 (4) 来描述。随着科技的发展，目前利用布拉格衍射原理制作的由计算机控制的 X 射线衍射仪已成为新材料研究中不可或缺的重要仪器。

现代的 X 射线衍射仪的原理如图 14 所示，从 X 射线管射出的 X 射线经准直后照射在样品上；在测量过程中样品在计算机的控制下匀速转动，其入射角以一定的角速度变化，测量衍射光强的探测器则以 2 倍于入射角的角速度变化；由此来记录衍射光强随入射角的变化，从而测出各个晶面间的面间距。图 15 给出了比较典型的粉末晶体 Si 的 X 衍射图，每一个衍

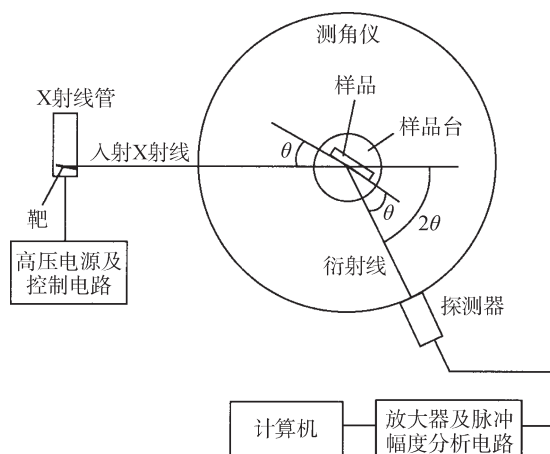


图 14 现代 X 射线仪原理图

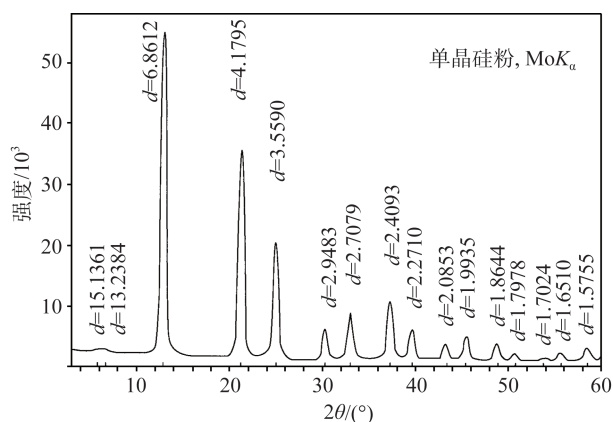


图 15 单晶硅粉的 X 射线衍射图《X 射线衍射方法与应用》

射峰对应一簇晶面的面间距，通过计算机与已知晶体的衍射资料库进行比对即可确定样品是什么晶体，或者发现新的晶体。

## 四、X 射线发现的意义及影响

X 射线的发现揭开了现代物理学革命的序幕，推动了物理学自身的发展，造就了许多诺贝尔奖获得者。包括 1912 年劳厄发现 X 射线晶体时发生衍射现象，从而获得 1914 年诺贝尔物理学奖；布拉格父子进一步发展了劳厄的晶体衍射理论，因创立了 X 射线晶体结构分析而获 1915 年的诺贝尔物理学奖等。而 X 射线晶体衍射现象和 X 射线晶体学发现对人类科学发展的影响也甚是巨大，特别是微观结构科学的影响。因此，本文通过回顾 X 射线的发现，以及 X 射线晶体衍射现象和 X 射线晶体学的研究，来纪念它具有特殊的重要意义。