

吴有训在 X 射线气体散射问题上的贡献¹⁾

王大明

(中国科学院科技政策与管理科学研究所)

到本世纪二十年代末,虽然中国的物理学工作者已先后做出了一批具有国际水平的贡献²⁾,但的确这些都是在外国,是借助外国的某些工作条件完成的。那时,真正立足于国内的研究工作,仅仅还处在最初级阶段,但应该说已经开始起步了,起步的标志之一,正是吴有训关于 X 射线的气体散射问题的研究。对此,严济慈先生曾给予高度的评价,他认为吴有训的该项工作“实开我国物理学研究之先河。”^[1]

吴有训在美国芝加哥大学留学时期的工作,基本上都在实验方面,通过实际锻炼,他已熟练地掌握了相当精密的实验技巧。但遗憾的是他没有能充分地发挥这方面的专长,原因在于受到当时我国国内实验条件落后的现状的限制。清华大学物理系大约是当时条件较好的地方了,但真要开展实验物理方面的研究,依然是困难重重。这大概就是吴有训回国后改做带有理论性质工作的缘故吧。

吴有训于 1926 年回国,1928 年担任清华大学物理系教授。他一面教学,一面着手进行研究工作。清华大学当时订有多种外文期刊,所以在资料文献方面有一定的优越条件;实验条件固然困难,但研究工作还是可以进行的。从 1930 年 10 月于英国《自然》杂志上发表回国后的第一篇理论性文章起^[2],吴有训对 X 射线经单原子气体、双原子气体和晶体散射的散射强度,温度对散射的影响以及散射系数等问题,进行了一系列理论探索,取得了很大的成绩。现在我们就循着这条线索来追溯一下他的这一段学术历程。

关于 X 射线的气体散射问题,实际上早在 X 射线发现后不久,就有人开始研究,例如 W. K. Röntgen (1896) 和 G. Saguac (1898) 等人,还有稍后一些的 C. G. Barkla (1903) 和 J. A. Cronther (1907) 等人。由于缺乏单色 X

射线源等许多技术上的困难,这些研究基本上都属于定性的研究,其理论上的概括,则包括在 J. J. Thomson 的经典散射理论之中。

Compton 效应的发现和量子力学的建立,使局面有很大改观。Thomson 理论无法解释的非相干散射问题逐渐有了合理的阐述,经典的散射理论结合着现代量子理论开始为 X 射线气体散射问题打开了大门。1928 年以后,印度的 Raman, 英国的 A. H. Compton, 先后各自独立地从理论上考察了 X 射线经单原子散射时的情形,并都推导出了(尽管从不同的观点出发)包括相干和不相干两种情况的全散射 (total scattering) 射线强度的数学表达式。这就是吴有训开始此项工作的基础。

“X 射线经单原子气体之全散射的强度”^[2],是吴有训在这个新时期的首篇论文。很自然地,文章回顾并评论了 Raman 和 Compton 的工作,Raman-Compton 公式为

$$I_{\theta} = \frac{Ie^4(1 + \cos^2\theta)}{2m^2R^2c^4} \left\{ Z + (Z^2 - Z) \left[\int_0^a 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} dr \right]^2 \right\}, \quad (1)$$

其中 I_{θ} 是散射角 θ 方向、距离 R 处的射线强度, I 是入射线强度,

$$k = (2\pi/\lambda) \sin \frac{\theta}{2}, \quad 4\pi r^2 \rho(r) dr$$

是电子在 $r-r+dr$ 之间出现的几率, a 是原子最大半径。考虑 Compton 效应并将上式分为相干和不相干两部分,则(1)式变为

$$I_{\theta} = \frac{I_2}{[1 + \gamma(1 - \cos\theta)]^3} + I_1, \quad (2)$$

1) 今年是吴有训先生(1897—1977) 诞辰九十周年和逝世十周年, 仅以此文作为对这位我国物理学界的先驱者的纪念。

2) 参见戴念祺:“本世纪二十年代以前的中国物理学者”,《中国科技史料》,第 2 期(1981), p. 17; 姚蜀平:“近代物理学在中国的兴起”,《物理》,第 11 卷,第 8 期(1982), p. 473 等。

$$\text{其中 } I_1 = \frac{Ie^4(1 + \cos^2\theta)}{2m^2R^2c^4} Z^2F^2, \quad (3)$$

$$I_2 = \frac{Ie^4(1 + \cos^2\theta)}{2m^2R^2c^4} Z(1 - F^2), \quad (4)$$

$$\text{而 } F = \int_0^a 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} dr \quad (5)$$

是原子的结构因子, I_1 和 I_2 分别代表相干和不相干散射线的强度, $r = h/mc\lambda$ 是 Compton 引进的一个系数。对于如何计算出此式的解, 吴有训提出了自己的看法。他认为, 若取代单个电子的可能位置(或位置几率), 而将 $4\pi r^2 Z \rho(r) dr$ 看成是 $r-r+dr$ 之间的电子数目, 则全散射之强度的计算就完全依赖于电子在原子中的电荷分布了。而这种分布已由 Thomson 和 Fermi 各自独立地给出了其表达式, 将此式代入(2)式中, 便可对任意角度的散射线强度进行数值上的估算。据此, 吴有训本人已经实际地计算了 X 线经氦和氢气散射后的强度分布, 并与 Barrett 的实验结果^[5]进行了比较, 图 1 就是比较的结果。线 I, II, III 都是理论计算结果, 虚线 C 代表了 Thomson 理论的结果, 符号“×”, “○”和“●”皆是实验点。虽然计算与实测吻合极好, 但吴有训认为这并不能完全说明问题, 因为 Barrett 所测量的只不过是强度的相对值, 而真正的比较应当是与绝对值作比较。

吴有训最后提纲挈领地指出: 通过以上方法, 全部单原子气体或蒸汽的散射原则上都可以进行近似估算。实际上他已经计算了 MoK_α 线和 CuK_α 线经 He, Ar, Ne, Kr, Na, K 和 Hg 等气体散射后的强度, 问题在于需要与实验进行对照。关于单原子气体, 吴有训嗣后还有两篇论文发表^[4], 除继续对前面的工作加以扩展和阐释外, 还吸收了一些新的实验成果进行对比, 结果表明, 基于 Raman-Compton 理论所导出的公式, 依然同实验有较好的吻合。另外, 应该说明一下, 几乎就在吴有训按照 Raman-Compton 所确定的路线前进的同时, 也有人用不同的方法对此问题进行研究, 如德国的 Wentzel, Herzog, 美国的 Jauncey 以及英国的 Waller 和 Hartree 等。对吴有训在此处的贡献,

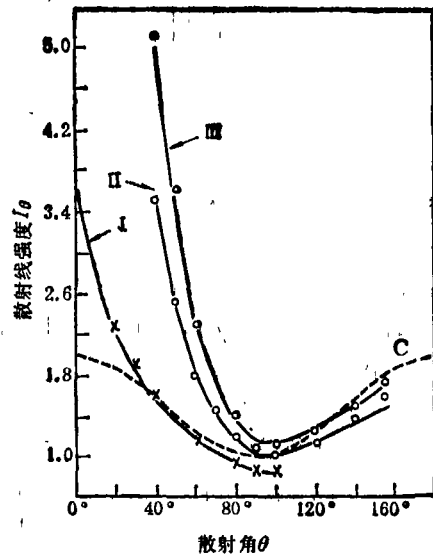


图 1 X 射线经单原子气体散射后射线强度的理论值与实验结果的对照^[5]。

A. H. Compton 在 1935 年版的《X 射线的理论和实验》一书中, 给予了较高的评价^[2]。

1931 年上半年, 吴有训开始研究双原子气体的 X 线散射问题。6 月, 在美国《物理评论》上连续发表了两篇论文^[6]。

在单原子气体的情形中, 由于各原子(或气体分子)的无规则热运动, 可不考虑由不同原子所散射的射线之间的干涉; 但对双原子(乃至多原子)气体则必须对此加以考虑。吴有训认为, 只有分子中各原子间的相干辐射才有干涉产生, 不相干辐射只需简单叠加起来即可。按此原则, 他将原来仅适用于单原子气体的散射公式[见(1)式], 推广到多原子气体的情形中去。假设气体分子中有 n 个原子, (1)式即为

$$I_{\theta n} = Ie \sum_i \sum_j F_i F_j \frac{\sin X_{ij}}{X_{ij}} + Ie \sum_i \frac{Z_i - F_i^2/Z_i}{[1 + r(1 - \cos\theta)]^3}, \quad (6)$$

其中 $Ie = \frac{Ie^4(1 + \cos^2\theta)}{2R^2m^2c^4}$, $X_{ij} = kS_{ij}$,

S_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子间的距离。(6)式最简单的实例莫过于双原子气体的散射了, 于是(6)式可化为

$$I_{\theta} = 2I_e \left\{ \left(1 + \frac{\sin X}{X} \right) F^2 + \frac{Z - F^2/Z}{[1 + \gamma(1 - \cos\theta)]^3} \right\}. \quad (7)$$

这里分子中的两个原子为相同的原子。

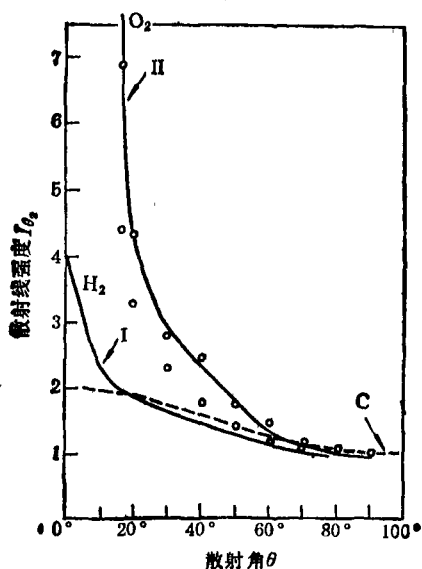


图2 X射线经双原子气体散射后,射线强度的理论值与实验结果的对照^[7]。

吴有训利用此式对一些实际情况进行了推算。图2是他将 MoK_α 线经 H_2 和 O_2 气体散射后的强度估算值与 Barrett 的实验数据对比的结果。可以明显看出,对 O_2 气体(曲线 II),理论与实验非常吻合, H_2 气体(曲线 I)则在数量级上相合(图中虚线 C 代表 J. J. Thomson 的经典理论的计算结果)。

吴有训十分重视全散射中非相干散射的作用,虽然当时对非相干散射过程还无法作出更细致的描述,他仍在论文的最后写道:“按照这里所提出的观点,每一分子非相干散射的强度,应当既独立于散射物质的物理状态,也独立于其温度,它只简单地与散射时分子的有效数目成比例。因此,我们可以预期,非相干散射将在 X 射线经气体、液体以及固体的散射中占据重要的地位。”^[7]后来的发展证实了他的预言^[8]。

在后续的论文中,吴有训除了对照实验结果,对理论进行了一些修改之外,还就所谓“校

正因子”(correction factor),即 $[1 + \gamma(1 - \cos\theta)]^{-3}$ 进行了较详细的讨论。

这个因子最初是由 Compton 引进的^[9],当初多少带有一点任意性,而它的意义究竟何在还不十分清楚。吴有训在讨论时首先列举了有和没有校正因子的两组计算值,然后与实验数据加以对比。结果表明:当散射角较小时(例如 $\theta < 90^\circ$),两组计算值的差异不甚显著;而当大角度散射时,二者就相差甚远了。经校正的计算值与观测值十分接近,而未经校正的值则远远地偏离了实验数据。这说明由量子理论得出的这个因子主要在于非相干散射中起作用,不管是对较短还是较长波长的 X 射线均如此。美国芝加哥大学 Ryerson 物理实验室的 Harvey 教授当时对吴有训澄清这一问题的贡献评价颇高^[10]。作为一个小插曲,也许这儿应该提一下吴有训与美国华盛顿大学的 G. E. M. Jauncey 教授之间的一场小小的学术之争。

1932 年 2 月,吴有训在《物理评论》上发表了题为《双原子气体的 X 线散射》一文^[11],文章的结尾部分提到了 Jauncey 的类似工作。吴有训认为 Jauncey 的散射强度公式,除了缺少一个校正因子外,可认为与自己的公式相同。但 Jauncey 却不同意吴有训的看法(见文献[11],第 561 页),他以为吴有训的公式是不正确的,理由是:首先,在他看来,没有校正因子对计算值的影响并不很大(因而他自己的公式中没有这种因子);其次,他认为吴有训的公式在校正因子可以忽略时,也无法过渡到自己的公式上来(而吴有训认为这是可能的),也就是说,两人的公式似有一定的冲突,至少是不一致的。

对此,吴有训经过仔细地分析后指出:Jauncey 以为两个式子在一定阶段无法过渡为同一形式,是因为他把真实原子结构因子(true atomic structure factor) F 与平均原子结构因子 F' 严格地区别开了。实际上,吴有训写道:“不存在任何物理上的或数学上的理由能认可这种区别”。所以,Jauncey 的推论首先是建立在错误的基础之上。吴有训继续写道:“如果将相干和不相干散射加以适当地分离,则 Ja-

uncey 所指出的不一致就不复存在了。”^[12] 同时, 他还将自己的理论结果与美国实验物理学家 Wollan 的实验数据^[13]作比较, 令人信服地阐明了以上分析的正确性。Jauncey 没有再提出异议, 争论宣告结束。

1931年, 吴有训把目光投向一个新问题: 关于温度对晶体的 X 线散射过程的影响^[14]。

最先注意并涉足其中的人是 Debye。他根据 M. Born 和 H. A. Kramers 的晶格力学理论, 推导出了一个温度因子, 将此因子乘以规则反射的 X 线强度, 大致还能得出与实际相吻合的结果。但随着 X 线漫反射和散射现象研究的深入开展, 情况就发生了变化。吴有训指出: 早在二十年代就已有实验表明, 在漫散射的情形中, 实际测得的散射线强度比 Debye 公式的计算值要大得多, 而强度随温度的变化却比其理论预测慢得多。此外, Compton 效应的发现, 说明所谓 X 线漫散射即是非相干散射, 这使得从规则反射情形中总结出来的 Debye 理论必须加以修正。

吴有训在考虑这个问题时利用了他研究气体散射时所做的假设, 即假设 X 射线被双原子气体散射时, 只有从分子中不同原子散射出来的相干辐射才有干涉效应, 而非相干辐射只需简单地相互叠加。将此方法运用于晶体时, 他认为: “在考虑 X 线的晶体散射时, 也只有从不同晶格来的相干辐射方能按经典波动理论的规律发生干涉, 非相干辐射则只有简单叠加。”这样一来, 漫散射线的强度几乎不随温度而变化的现象就很容易理解了, 其原因无非是: 非相干散射的强度是独立于温度之外的。

依此, 再考虑 Debye 的公式, 吴有训导出了有温度因子的散射线强度表达式:

$$I_0 = Nlc \left\{ (1 - e^{-B}) P^2 \times \frac{Z - F^2/Z}{[1 + \gamma(1 - \cos\theta)]^3} \right\}, \quad (8)$$

式中只给第一项, 即相干散射部分增加了一个由 Debye 所提出来的温度因子 $(1 - e^{-B})$ 。

吴有训的这一系列工作在国内外均获得了好

评, 特别是德国哈莱的自然科学院为此而推举他为会员, 并向他颁发了荣誉证书^[15]。

到三十年代中期, 吴有训的研究课题是关于 X 线的气体散射系数问题, 吸收系数等, 且多是与他人合作进行的¹⁾。

据赫崇本先生回忆²⁾, 1936年前后, 吴有训曾计划用已渐渐扩充起来的清华大学物理实验室进行一些真正的实验工作, 主要是想用盖革计数管取代电离室方法来进一步研究 X 线和 γ 线的散射等问题。但准备工作尚未就绪, 抗日战争就爆发了, 随着学校的南下西迁, 这个计划不得不中途作罢了。

本文是在我的导师范岱年先生、解俊民先生的指导下完成的。在写作过程中, 还得到钱临照、赵忠尧、王淦昌、赫崇本、钱三强等先生给予的多次关怀和帮助, 在此一并致以诚挚的感谢。

参考文献

- [1] 严济慈, 科学, 19(1935), 1706.
- [2] Y. H. Woo, *Nature*, 126(1930), 501.
- [3] Barrett, *Phys. Rev.*, 32(1928), 22.
- [4] Y. H. Woo, *Sci. Repts. of National Tsing Hua Univ., First Series*, 1-2(1931), 55-67; 1-4(1932), 135-143.
- [5] A. H. Compton and S. K. Allison, *X-Rays in Theory and Experiment*, D. Van Nostrand Co., (1935), 135.
- [6] Y. H. Woo, *Phys. Rev.*, 37(1931), 467-475.
- [7] Y. H. Woo, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 17(1931), 470.
- [8] 谢忠信等编著, X 射线光谱分析, 科学出版社, (1982), 60.
- [9] A. H. Compton, *Phys. Rev.*, 35(1930), 925.
- [10] G. G. Harvey, *Phys. Rev.*, 43(1933), 591.
- [11] Y. H. Woo, *Phys. Rev.*, 39(1932), 555-560.
- [12] Y. H. Woo, *Phys. Rev.*, 41(1932), 22.
- [13] E. O. Wollan, *Phys. Rev.*, 37(1931), 862; *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 17(1931), 475.
- [14] Y. H. Woo, *Phys. Rev.*, 38(1931), 6-14.
- [15] 科学, 20(1936), 157.

1) 合作者主要是孙珍宝先生 (C. P. Sun), 参见 *The Science Reports of National Tsing Hua Univ., Ser. A, Vol. III, No. 6(1936)*, 549-553.

2) 根据笔者与赫崇本先生的谈话记录; 赫崇本先生当时是清华大学物理系的助教 (他现在是山东海洋学院名誉院长, 我国著名海洋物理学家)。