

同步辐射光源及其应用研究综述^{*}

曾昭权

(云南大学 实验中心, 云南 昆明 650091)

摘要: 简要回顾了同步辐射研究的历史, 较详细介绍了同步辐射光源的频谱特性、光源结构、实验方法及国内外应用研究的发展状况及研究亮点。

关键词: 同步辐射光源; 应用研究; 频谱特性; 光源结构

中图分类号: O 433 文献标识码: A 文章编号: 0258-7971(2008)05-0477-07

同步辐射是速度接近光速的带电粒子在磁场中沿弧形轨道运行时发出的电磁辐射。

早在 19 世纪末, 经典电动力学研究运动电荷的电磁场时, 导出了运动电荷产生的李纳-谢维耳势, 亦称推迟势^[1]。从推迟势的计算中, 可以证明作匀速直线运动的点电荷不辐射能量, 但加速运动的电荷将产生电磁辐射。这为马可尼发明的无线电报、赫兹发明无线电振子天线和伦琴发现的 X 射线提供了理论解释的基础。无线通讯和无线电广播的天线就是利用电子沿直导线作简谐运动时产生的电磁辐射, 而伦琴射线则为真空中高能电子轰击金属靶时速度骤减发出的韧致辐射。

1912 年肖特(G. A. Schott)发表专著^[2], 论述了作圆周运动电子的辐射理论。1947 年哈伯(F. Haber)等在美国通用电气公司 70MeV 电子同步加速器上首次观察到这种辐射, 由于它是在电子同步加速器上被观察到的, 故称做同步辐射, 英文名为 Synchrotron radiation, 简称 SR。

1949 年美国的施温格(J. Schwinger)测定了同步辐射的性质^[3]。此后, 还有索科洛夫(A. A. Sokolov)、杰克逊(J. D. Jackson)及其他许多人, 相继展开了更深入的研究。然而, 直到 1970 年以前, 电子同步加速器仅只作为高能物理学家产生高能粒子, 用以研究高能物理学的工具, 同步辐射作为它的伴生副产物, 并未得到真正应用。相反, 由于同步辐射耗费了电子的能量, 使被加速粒子能量

难于进一步提高; 另外, 为防护同步辐射对人体的危害, 还加重了实验室的劳保负担。

1970 年以后, 人们认识到, 必须对同步辐射充分加以利用, 否则无异于一种极大的浪费。因此, 1970 年以后新建造的电子同步加速器, 一般在存储环上都备有专门的同步辐射束线输出口, 沿弯转磁铁的切线方向输出辐射。

为了进一步提高光源亮度, 1980 年发明了扭摆器和波荡器, 新建造的电子同步加速器普遍安装了扭摆器和波荡器等新型插件, 作为同步辐射的束线输出装置, 使同步辐射光源亮度在原有基础上又提高了上 1 000 倍。目前世界上运行着的大型同步辐射光源均属于这一类。电子同步加速器也因此成为专用的同步辐射光源。

扭摆器是一组极性交替变化并按周期排列的磁铁, 用以产生垂直方向周期变化的磁场, 电子在扭摆器中做近似正弦曲线的扭摆运动, 由于扭摆磁场比电子存储环的弯转磁场高许多, 输出同步辐射频谱呈连续分布, 且强度也大为提高。

波荡器与扭摆器的结构类似, 它与扭摆器的主要区别是磁场比弯转磁场低, 磁场变化的周期短, 周期数多, 电子在波荡器中运动轨迹也为近似的正弦曲线, 但振幅小。在一定条件下, 由于光的相干效应, 使输出的同步辐射亮度更进一步提高, 比扭摆器的输出提高 1 000 倍, 且频谱的短波部分由原来的连续谱变为许多离散的峰组成的线状频谱。

* 收稿日期: 2007-05-08

作者简介: 曾昭权(1936-), 男, 四川人, 教授, 主要从事原子分子物理和光谱学研究。

1 同步辐射的优异特性

在同步辐射光源中,高能电子产生的同步辐射主要集中在电子存储环切线方向上很小的锥角内.当沿电子运行轨道平面的某一固定位置观测时,所接收到的是这一狭窄锥角内扫过的很短的脉冲.对此辐射脉冲进行付立叶变换,便得到同步辐射的频谱分布函数.如图 1 所示为日本 Spring-8 同步辐射光源的频谱特性曲线^[4],从图中可以看出:

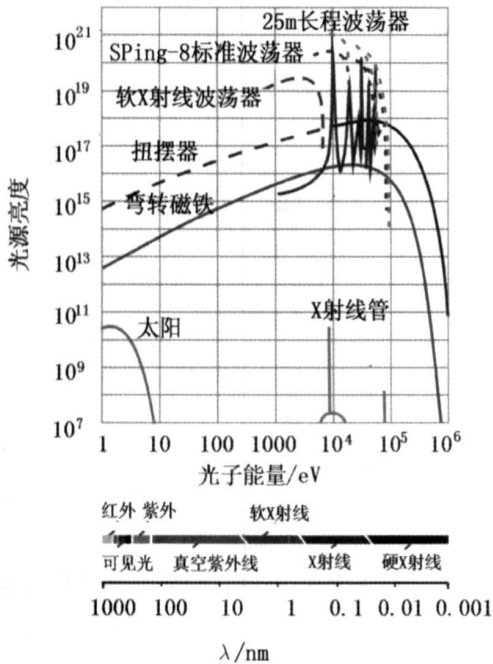


图 1 日本 Spring-8 同步辐射光源频谱曲线

Fig. 1 The frequency character curve of Spring-8 SRS

1.1 宽阔的频谱分布^[4] 同步辐射具有非常宽阔的频谱分布:包括从红外、可见、紫外、真空紫外、软 X 射线到硬 X 射线这样广阔的频谱区域.现今已知的人工光源和天然光源(如太阳),没有哪一种光源含有如此宽广的频谱.以分析测试和科学研究仪器所用光源为例,射频、微波频谱区域的气体微波波谱仪、付立叶变换核磁共振仪和电子顺磁共振仪等,用射频、微波振荡器做光源,特别有意义的频谱范围一般在几十 MHz、几百 MHz 甚至数千 MHz (注:频率 3~300 MHz,波长相应为 1~100 m 的辐射称做射频;频率 300~300 000 MHz,相应的波长为 1 m~1 mm 的辐射称做微波);远红外、中红外和近红外分光光度计用热光源:钨灯、卤素灯或高温石墨辐射体做光源,使用频段:近红外光谱:0.76~2.5 μm ;中红外光谱:2.5~25 μm (相应于 400~

4 000 cm^{-1});4000~10 cm^{-1} (25~1 000 μm)为远红外光谱,其中特别重要的光谱区域是中红外光谱.在可见光谱区域,用电弧、火花、氩气体放电等离子体、低压气体辉光放电管、空心阴极管和激光器等气体放电器件或半导体激光器件做光源,相应的仪器有可见光分光光度计、等离子体发射光谱仪、荧光分光光度计、激光拉曼光谱仪和其他类型的可见光谱仪器,光谱响应范围:0.40~0.76 μm ;紫外和真空紫外分光光度计用气体弧光放电灯如氘灯或氙灯做光源,有效光谱范围:0.4~0.16 μm .介于 0.16 μm 以下,软 X 射线以上的波段则研究较少;X 射线荧光光谱仪、X 射线衍射仪和其他 X 射线影相仪器和无损检测仪器用 X 射线管做光源,这是非常重要的频段,现今许多重要的研究均在此频段进行.

由于同步辐射频谱覆盖了除射频和微波以外的所有频段,所以同步辐射光源含盖了上述大多仪器光源的应用范围,在许多研究领域很自然能得到广泛应用.

1.2 极高的光源亮度 同步辐射光源亮度极高,亮度的频谱分布连续且变化平缓(波荡器输出束线的 X 射线部分除外,由于光的干涉效应,输出频谱呈现线状光谱结构),与普通人工光源和天然光源相比,呈现很大差别,如图 1 所示,太阳光和 X 射线管亮度频谱曲线相较之下显得狭窄,且亮度远低于同步辐射,以弯转磁场输出的同步辐射为例,其亮度比太阳光的峰值亮度高上 1 000 倍,比 X 射线管高 100 万倍;其它人工光源的亮度及频谱特性均不能与之相比.激光是一例外,它的亮度可以很高,相干性极好,且光束准直,也是一种性能优异的光源,但其频谱却十分狭窄,有广泛而特殊的用途,自应另当别论.

同步辐射的高亮度,可以获得很高的光信号检测信噪比,使测量精度和检测灵敏度大为提高,过去很困难或无法进行的测试和研究工作,现在可以在同步辐射实验站顺利完成.其中特别重要的是 X 射线频段,常规 X 射线衍射仪通常使用的光源功率为几 kW 旋转阳极 X 射线管,为了提高光源亮度,必须加大 X 射线管的功率,目前商用仪器 X 射线管功率能达的水平约 25 kW,要进一步提高,势必增加成本且技术上有不少困难.因此寄希望于同步辐射 X 射线频段的应用.研究表明,采用同步辐射的 X 射线进行实验,原来需要很长时间如 1 个

月才能做完的工作, 现在可以在几分钟内完成, 进行分子结构测定的精度更高, 更重要的是能够完成用常规方法不能完成的研究任务。

1.3 发散角小 同步辐射光束线的发散角小, 平行度高, 容易进行光束结构变换。

1.4 相干性好 同步辐射波荡器输出的部分同步辐射和自由电子激光都具有相干性, 这一极其优异的特质, 使得相干 X 射线同步辐射具有无可比拟的应用潜力。

由上述可见, 同步辐射确实是一种性能优异的光源。从 20 世纪 90 年代起, 世界上各发达国家及少数发展中国家竞相发展, 纷纷投入巨资建造专用的同步辐射光源, 开展高科技攻关研究, 已经取得

许多用常规实验方法不能获得的重要成果。在新一轮科技创新研究中, 同步辐射光源必定能发挥出更为突出的作用。

2 同步辐射光源的基本结构

同步辐射光源装置由电子注入器、电子输运线、存储环、插入装置、同步辐射束线室和实验站等 6 部分组成。现以台湾 NSRRC 同步光源实验装置^[5]为例(图 2)逐一加以说明:

(1) 电子注入器包括电子枪、电子直线加速器和环型加速器 3 部分。直线加速器(LINAC)将电子预加速到 50 MeV, 然后经过环形加速器(BOOSTER RING)最终加速到预定的能量 1.5 GeV;

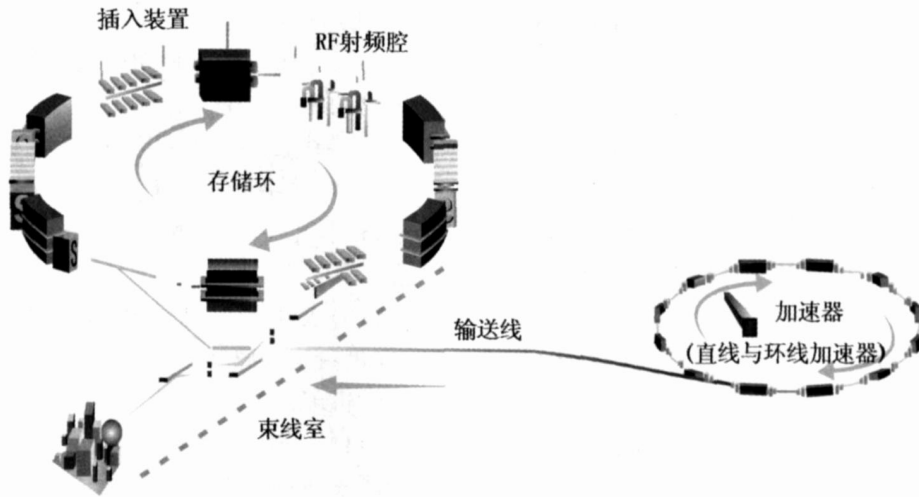


图 2 台湾 NSRRC 同步辐射光源结构示意图

Fig. 2 The structure diagram of NSRRC SRS in Taiwan

(2) 电子输运线用于将已加速到预定能量的电子送至电子存储环;

(3) 电子存储环是同步辐射装置的核心部分, 用于存储高能电子, 一切实验工作均围绕存储环进行。NSRRC 光源存储环圆周长 120 m, 1.5 GeV 高能电子在超高真空室内作圆周运动, 弯转磁铁和其它插入装置沿圆周配置;

(4) 插入装置是一组极性周期交替变化的磁铁, 用以产生亮度更高的同步辐射。扭摆器和波荡器是常用的插入装置;

(5) 同步辐射束线室内配置各种光学器件, 将光束聚焦或改变方向后进入实验站供给实验者使用;

(6) 同步辐射实验站内安装有为特定研究目的配备的设备或仪器, 从束线室送来的同步辐射光作为仪器设备的光源并在其上进行研究和实验。通常, 在同一座同步辐射光源上装备有数个或数十个实验站。

3 世界同步辐射实验装置及所在国别概况

(1) 世界 3 座超大型同步辐射装置 目前世界上 3 座超大型同步辐射装置分别于 20 世纪 80 年代末 90 年代初建造在日本、美国和法国。20 世纪 90 年代中期投入使用。光源存储环最大周长 1 436 m, 最大电子能量 8 GeV, 最大光束线数和实验站数 68 个, 相关资讯列于表 1。

表 1 世界 3 大巨型同步辐射光源装置

Tab 1 The three sets giant SRS in the world

装置名称	国别	安装地	能量/GeV	束线数	存储环周长/m	建造时间	启用时间
Spring-8	日本	兵吾	8	62	1 436	1991~ 1997	1997
APS	美国	阿贡	7	68	1 104	1989~ 1994	1996
ESRF	法国	格勒诺布尔	6	56	844	1988~ 1994	1994

截至 2007 年底止,世界范围内在运行的共有 45 座同步辐射光源,另中国和英国各有 1 座在建,中国在建光源建造于上海.在运行的光源中,美国有 10 座,日本有 8 座,德国有 5 座,法国和中国各有 3 座(包括台湾的 1 座),意大利 2 座,俄罗斯、加拿大和英国各 1 座.其它分属于欧洲国家 5 座,亚洲国家 4 座,南美国家 1 座,澳洲国家 1 座.从这组简单数据可见,美国、日本、德国和法国在同步辐射研究方面占有优势.

(2) 上海同步辐射光源主要技术指标 上海同步辐射光源建在上海浦东张江高科技园区,投资 12 亿元人民币,2004 年始建,预计 2009 年建成投入试运行.光源存储环周长 492 m,电子能量 3.5 GeV,首批将建设 7 条光束线和相应的实验站.主要技术指标达到国际同类光源的先进水平,高于北京同步辐射光源 BSRF 和合肥同步辐射光源 SRL 的水平.

4 同步辐射光源的应用领域与实验研究方法

当被研究样品受到同步辐射照射时,一部分光被试样吸收,另一部分穿过试样成为透射光.此外,光和物质相互作用将发生多种次级过程,如非弹性散射、光电子发射、荧光辐射、反射光子、次级离子或中性原子、布喇格衍射和劳厄衍射等,如图 3 所示.

通过对吸收、透射和次级过程的检测,可以得到物质结构的多种信息包括化学性质、空间结构、电子结构、表面状况、光学和磁学性质等.通常使用的实验方法可归属于三大类:

4.1 X 射线衍射和散射 由 X 射线衍射和散射发展而来的实验方法有:

(1) 极端条件下的 X 射线衍射,用于研究高压、高温或低温下物质的相变;

(2) X 射线粉末衍射,用于研究无机晶体的精密电子分布,物质的结构与相变;

(3) X 射线表面衍射,用于研究表面与界面的原子结构,表面相变与催化反应;

(4) X 射线衍射驻波法,用于研究表面或界面的几何结构;

(5) 小角度散射,用于研究蛋白质和生物聚合物的形貌,肌肉纤维动力学性质;

(6) 中角度散射,用于研究非晶态、液体和熔融态物质的局域原子结构;

(7) X 射线磁散射,用于研究磁结构,物体及其表面的磁学性质;

(8) 剩余应力分析,用于研究物体三维应变图;

(9) 核共振散射,用于研究时间域穆斯堡尔光谱学;核非弹性散射,用于研究电子跃迁引起的核激发;

(10) X 射线单晶衍射,用于研究大分子结晶学:如蛋白质的原子结构与功能;生物反应的时间相关性机理;

(11) X 射线非弹性散射,用于研究声子激发、电子激发和基态的电子相关性;

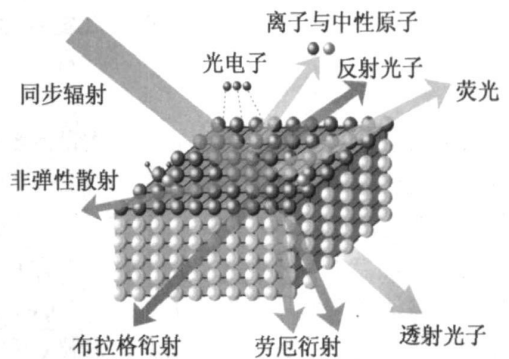


图 3 同步辐射与物质相互作用及其次级过程示意图

Fig. 3 The second process diagram of interaction between SR and matter

(12) 康普顿散射、康普顿磁散射,用于研究材料中电子动量分布,铁磁物质电子磁性.

4.2 光谱学与光谱化学分析

(1) 光电子光谱学,研究特殊功能材料如高温超

导材料、磁性材料和高电子相关性材料的电子结构;

(2) 原子与分子光谱学, 研究中性原子和简单分子的光离化光谱、光子吸收光谱和光电子光谱; 多电荷离子光谱;

(3) X 射线荧光光谱学, 研究超微量元素分析; 微量元素的化学状态, 考古和地质学研究;

(4) X 射线吸收光谱的精细结构、X 射线吸收光谱学, 研究非晶态物质、薄膜、催化剂、金属蛋白和液体中指定原子周围的原子结构与电子态;

(5) X 射线圆二色分析, 用于研究固体、薄膜和表面的磁学性质, 测定轨道和自旋磁矩;

(6) X 射线光子相关光谱学, 研究原子尺度无序系统动力学, 临界点附近的密度起伏;

(7) 红外光谱学包括红外显微光谱学, 研究各种物质的红外反射和吸收, 测定物质的分子结构。

4.3 X 射线成像术

(1) 折(射)衬成像术, 用于研究低吸收样品的成像;

(2) 相衬成像术, 用于研究生物样品的 X 射线干涉成像;

(3) X 射线显微层析摄影术, 用于研究物质结构的三维图像, X 射线荧光显微层析;

(4) X 射线荧光显微学、X 射线扫描显微学, 研究痕量元素分布图;

(5) X 射线显微学, 研究材料放大的显微图像;

(6) X 射线形貌学, 研究晶体生长的静态和动态过程, 晶体的相变和弹性形变, 晶格的缺陷;

(7) X 射线全息学, 直接研究物质三维原子图像;

(8) X 射线光电子发射显微学, 研究表面化学反应及磁畴结构等;

(9) X 射线光学, 研究相干 X 射线成像技术和 X 射线量子光学技术。

5 应用研究亮点举例

当前, 世界范围内数十座同步辐射光源在不停运行。据斯坦福大学、加州伯克利分校同步辐射实验室资料介绍, 每年有上千位学者、研究人员分别到他们实验室做访问研究, 研究成果正在源源不断作出。限于篇幅, 不可能一一做详细介绍, 为了对相关领域研究成绩得到初略了解, 这里仅就其研究亮点作如下扼要介绍:

5.1 同步辐射服务于航空航天与宇宙观测的相关研究 1990 年, 美国“发现”号航天飞机将哈勃太空望远镜送入太空。3.6 a 和 6.8 a 后, 美国航空航天局从哈勃望远镜回收的样本发现, 其镀铝 FEP (Fluorinated ethylene propylene, 氟化乙丙烯) 特氟隆反射镜表面发生龟裂和塑料性能退化, 认为太阳耀辉的真空紫外和软 X 射线辐照是使塑料性能改变的直接原因。经布鲁克海文(Brookhaven) 国家实验室用 18 nm (69 eV) 至 0.65 nm (1900 eV) 的同步辐射(相当于太阳耀辉发射的真空紫外辐射和软 X 射线), 照射镀有 100 nm 厚铝膜的 FEP 特氟隆塑料, 进行等剂量模拟实验, 结果显示特氟隆塑料的退化与龟裂程度比预期的小^[6]。哈勃太空望远镜运行轨道在地球上空 575 km 轨道上, 属低轨道飞行器, 除太阳耀辉辐射外, 其它环境因素如大于 10 KeV 的连续 X 射线、电子和质子辐射、热交换、辐射与热循环协同效应等都会加速特氟隆塑料的退化, 因此低轨道航天器的环境成分及其对航天器的影响还须作进一步研究。

5.2 超光学成像^[7] 显微镜、望远镜、照像机及各种光学仪器(包括人眼) 成像都离不开透镜, 由于透镜的衍射效应, 常规光学仪器的图像质量和分辨率受透镜孔径和光源波长的限制。在光频区域, 费涅尔波带片具有成像功能, 但未能普遍应用。上世纪末提出 X 射线非透镜成像的设想, 同步辐射光源和自由电子激光器提供的相干 X 射线, 促成了相干 X 射线学的迅速发展, 相继出现 X 射线相干衍射、X 射线光子相关光谱学、班纹干涉计量学和超快速探测等实验新技术, 并把分辨率扩展到原子尺度, 时间探测达到飞秒水平。另一方面, X 射线相干光学也得到发展, H. H. Quiney et al. 在美国 APS (Advanced photon source) 同步辐射光源的 XOD 束线实验站展示了被称做超光学成像(Imaging beyond optics) 的研究。这项全新的成像技术, 利用 X 射线波带板做成像器件, 产生复波场图像, 不需要透镜, 图像分辨率能达到原子尺度水平, 且与所使用的波长无关。它的这一优点, 在许多研究领域如生物分子三维结构测定将得到重要应用。

5.3 单壁纳米碳管(SWCN) 氢存储机理研究——纳米科学 在未来的二三十年里, 减少煤和其它石化产品消耗, 降低温室气体排放, 开发新能源, 是世界各国共同的奋斗目标。太阳能、风能、热核能、氢燃料及近期提出的“种石油”等能源开发方案中, 氢

燃料的利用也十分引人关注. 氢很容易从电解水或用其它方法如光催化方法制得, 存储氢的燃料箱可以将氢作为动力或燃料, 甚至用于发电. 因此研发安全、高效、轻便的氢存储介质是氢能源得以成功应用的关键. A. C. Dillon^[8]指出纳米碳管是最有应用前景的氢存储介质. A. Nikitin 等在斯坦福大学的同步辐射光源 SSRL 上研究碳管的吸附机理, 所得 X 射线光子光谱和 X 射线吸收光谱显示, 纳米碳管对氢呈化学吸附, 吸附效率按质量百分比率计算可达 6% 左右. 纳米碳管的氢解吸附研究也很重要, 特殊情况下加热到 50~100 °C 度便可解吸附. 纳米碳管氢燃料存储的开发研究既属能源开发, 同时又是纳米科学关注的研究课题, 因此倍受关注.

5.4 利用单分子衍射构建生物分子三维结构图^[9] 生物大分子结晶学惯常要求测定生物大分子三维结构, 如何获得大尺寸高质量大分子晶体是研究工作的主要困难, 为此寻找测定分子立体结构新的实验方法, 一直是科学研究者努力的目标. 对低分子量生物分子, 核磁共振(NMR)可以获得很好的结果. 迅速发展的低温电子显微技术(Cryo-EM)弥补了NMR的不足, 其单分子成像分辨率达到0.7~10 nm 水平. 辐射损伤、样品移动及低对比度使低温电子显微技术应用受到一定限制. J. Mao 及其同事利用康乃尔大学同步辐射光源 CAMD 和加州大学伯克利分校的 ALS 装置, 首先得到 X 射线波带板产生样品冰冻干酵母的单分子二维衍射图像, 然后用迭代计算法提取图像的位相讯息, 最后构建得到样品的三维图像, 图像分辨率 40 nm, 这种技术称做 XRM 或 X 射线衍射显微术. 研究者相信对于非周期生物样品, XRM 的分辨率可以达到 10 nm 甚至更低.

5.5 X 射线多波长反常衍射(MAD)测定生物大分子结构——生命科学研究 测定生物大分子结构, 多波长反常 X 射线衍射(MAD)能够得到最高的图像分辨率. 1999 年加州大学的 H. Noller 等^[10]制备得完整的核蛋白晶体, 用该校同步辐射装置 ALS 的 5.0.2 束线测定分子结构, 其图像分辨率为 0.78 nm; 2001 年 M. M. Yusupov, H. noller 等^[11]将分辨率提高到 0.55 nm; 2005 年 B. S. Schuwirth, J. H. D. Cate 等^[12]又将细菌核蛋白体分子结构分辨率推进到 0.35 nm, 达到目前最高水平. 在此高分辨率下, 足以清楚辨别 RNA 中不同核苷的电子密度分布, 研究者可根据这些结果

重新审视以往的结论, 提出新见解, 进行新的理论分析. 核蛋白体分子巨大, 且结构不对称, 不易得到完整无缺的晶体, 这是目前研究工作成败的关键. 统计资料显示, 国际蛋白质资料库 PDB 从 1971 年始, 至 2006 年 7 月共收集巨型蛋白质分子结构 37 874 个, 其中 5 571 个由核磁共振(NMR)测得, 占 14.71%; 32 096 个由 X 射线单晶学方法测得, 占 87.6%. 1990 年用同步辐射测定的分子数只占 18%, 2005 年所占比例上升到 76%, 往后可望达到 90% 以上.

5.6 同步辐射红外束线用于有机半导体器件开发——材料科学研究 美国的 A. J. 赫格尔和 A. G. 麦克德米德及日本的白川秀树发明导电塑料, 彻底颠覆了人们对塑料是绝缘体不导电的认知, 他们 3 人因此获得 2000 年诺贝尔化学奖. 此后导电塑料的开发利用一直备受关注, 其中有机聚合物半导体器件开发更是格外受人青睐. 由于该材料重量轻、易成型、价格低, 易于大规模生产, 与硅半导体器件相比自有其独特的应用. 有机半导体器件特别适用于制作超大面积屏幕显示器、化学和生物传感器、太阳能电池等. 在其它领域, 同硅半导体器件一样也能得到广泛应用. 当前研究多集中于材料性能和机理分析. 2006 年 Li Z Q 等^[13]为开发有机半导体聚合物场效应晶体管(FET)和其它固体电子器件, 用同步辐射的红外光谱显微镜探测 FET 晶体管载流子的固有电学性质, 测定在不同条件下导电通道内载流子电荷的密度分布, 比较半导体-绝缘层的不同组合对载流子浓度的影响等. 该项研究得到美国能源部研究基金资助.

5.7 极端条件下物质结构与相变研究 高温、高压、低温、强光场、强电场、强磁场等极端条件下, 物质往往表现出异常性质, 低温超导、超流效应已为人所熟知. 还有其它例子, 如高压下四碘苯醌显示出超导性质; 同样在高压下不用催化剂实现乙炔的聚合物反应. 极端条件下物质的结构与相变长期以来一直是研究工作的热点之一. 最新的一项重要研究, NSRRC(中国台湾)同步辐射光源研究中心 Y. Q. Cai 领导的一个研究小组于 2005 年 4 月 15 日宣布^[14], 从 X 射线衍射、X 射线拉曼散射和光学拉曼散射实验获得的光谱数据显示, 冰在高压和 4~50 K 低温下可能存在新的物相. 这一论断把水的相结构由三相(水蒸汽、液态水和冰)变为四相, 另一方面预示着水分子结构可能出现新突破. 在美

国能源部科学研究基金支持下,阿贡国家实验室的 W. L. Mao, H. K. Mao 等于次年即 2006 年 10 月发表研究报告^[15]称,在低温下对冰施加 13 GPa 的超高压,用适当强度的 X 射线照射样品,水分子将发生键裂,生成氢分子和氧分子的混合物. 他们的实验分别在美国阿贡国家实验室 APS 及日本 Spring-8 同步辐射光源上完成. 有评论认为该成果令人惊异,所产生的氢氧混合物是一种高能材料,在获得氢能源方面又多了一种制备方法.

5.8 同步辐射应用于分子环境科学研究^[16] 分子环境科学不同于一般意义的环境保护研究,它充分利用同步辐射光源的优异性能. 主要采用 X 射线吸收光谱(XAS)或扩展 X 射线吸收精细结构光谱(EXAFS)方法,研究环境元素原子的电子结构(如氧化价的数目、能级的占有率)及其周围环境状况(周围原子类型、配位数、键长、键角),从而从分子水平认识环境元素细微结构特征. 这种方法已广泛应用于触媒、灰份、污染土壤、微生物吸附重金属和纳米碳管等分子环境科学的研究. 如零价纳米铁粉去除污染水中的镉,纳米镍锌磁氧化铁矿分解二氧化碳和转基因大肠杆菌吸附重金属汞等都是近期有意义的尝试. 斯坦福大学 SSRL 同步辐射光源实验室的 C. C. Fuller 等使用近边缘 X 射线吸收精细结构光谱(NEXAFS)分析法,在铀放射污染治理方面做了许多研究.

5.9 X 射线付立叶变换全息照相术^[17] 随着同步辐射光源波荡器相干 X 射线和自由电子激光的出现,上世纪中期发明的光学全息照相术立即被扩展到 X 射线波段. 为改善光学显微镜高放大倍率图像质量,通常做法是增加照明光源强度;为提高 X 射线显微镜的图像质量,也可以采用同样办法但以不损伤样品为原则,因而 X 射线强度增加是有限的. W. F. Wehlotter 等研究成功的 X 射线付立叶变换全息照相技术,用超短脉冲 X 射线频闪照相,既改善了图像质量,又不致损坏样品,特别适用于生物样品、塑料制品及亚皮秒动力学过程研究. 为产生全息干涉图,不透明屏上刻制的纳米尺度的多个小孔作为生成多重参考光束的器件,当软 X 射线从中穿过,并与来自样品的物体光束分别相干,再经付立叶变换和图像重建,便得到物体的三维全息图像. 这一技术的成熟应用,寄希望于相干性、光源强度和脉冲结构更好的同步辐射 X 射线新光源.

源.

5.10 同步辐射破解考古之谜 考古工作常常需要借助现代科学技术解答一些疑难问题. 这里以陕西出土文物秦甬及其“中国紫”为例,说明同步辐射能很好用于考古研究. 秦甬琉璃片上局部显示紫色,称做中国紫. 考古学家的问题是中国紫的来源? 埃及蓝、马雅蓝和中国紫是迄今人类发现最古老的颜料,有一种认为中国系由埃及蓝演变而来,但从年代推算,否定了这一论断. 因为官方丝绸之路开启于公元前 125 世纪,而中国紫应发生在战国时期,约为公元前 479~221 世纪,时代相隔太远. Z. Liu, A. Mehta 等于 2007 年 1 月发表同步辐射研究论文^[18],详细解说了中国紫的来历,认定中国紫是当时的道士的发明,其最初目的试图仿造翡翠,发现加入含中国紫颜料后能增强琉璃片的反光率. 他们还指出中国紫颜料的发明对青铜器制造和陶器技术的发展起到促进作用.

6 结束语

今同步辐射光源的应用研究方兴未艾,创新性研究成果正源源不断作出. 全世界的同步辐射实验室一般都实行开放管理,欢迎有关学科研究人员参与单独或合作研究,有的实验室还设有专门的科研基金,供需要者申请,为广大科技工作者尽可能提供方便. 这一情况值得关注,如有需要,可向相关实验室提出参与有关研究的要求.

参考文献:

- [1] MARIOR J B. Classical electromagnetic radiation[M]. New York: Academic Press, 1965.
- [2] SCHOTT G A. Electromagnetic radiation[M]. London: Cambridge University Press, 1912.
- [3] SCHWINGER J. Frequency character of synchrotron radiation[J]. Phys Rev, 1949, 75: 1 912.
- [4] SPRING-8 SRS. A brief introduction of spring-8 SRS [M]. Hyogo: Spring-8 Publisher, 2005.
- [5] NSRRC. How a SRS work [M]. Hsinchu, Taiwan: NSRRC Brochures, 2005.
- [6] MILINTCHOUK A. Influence of X-ray Solar Flare Radiation on degradation of space[J]. J Spaceer Rockets, 1997, 34(4): 542-548.
- [7] QUINEY H, PEELE A G, CAI Z, et al. Imaging beyond optics[J]. Nat Phys. 2006, 2: 101.

dissociation limits of the $X^2\Pi$ state of SiH, SiD, SiT molecules. The equilibrium separations, the harmonic frequencies and the dissociation energies about the $X^2\Pi$ states have been calculated by quantum mechanical ab initio method in the level of QCISD/6-311g (df, 2pd). The whole potential curves for ground states are scanned, then has a least squares fitted to the analytic Murrell-Sorbie potential function form. Last the spectroscopy constants and force constants are calculated, which are in good agreement with the experimental data.

Key words: SiH, SiD, SiT ground state; molecular structure and potential energy function; Murrell-Sorbie function

* * * * *

(上接第 483 页)

- [8] NIKITIN A, OGASAWARA H, MANN D, et al. Hydrogenation of single-walled carbon nanotubes [J]. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 225507.
- [9] MAO J, HODGSON K A new approach to 3D structures of biomolecules utilizing single molecule diffraction images [J]. *Nature*, 1999, 400 : 342-344.
- [10] CATE J H D, NOLLER H F, YUSUPOV M M, et al. X-ray crystal structure of 70S ribosome functional complexes [J]. *Science*, 1999, 285 (5436): 2 095-2 104.
- [11] YUSUPOV M M, CATE J H D, NOLLER H F, et al. Crystal structure of the ribosome of 5.5×10^6 resolution [J]. *Science*, 2001, 292: 883.
- [12] SCHUWIRTH B S, CATE J H D, BOROVINSKAYA M A, et al. Structures of the bacterial ribosome at 3.5×10^6 resolution [J]. *Science*, 2005, 310: 827.
- [13] LI Z Q, BASOV D N, WANG G M, et al. Infrared imaging of the nanometer thick accumulation layer in organic field-effect transistors [J]. *Nano Letters*, 2006, 6: 224.
- [14] CAI Y Q, MAO H K. Evidence suggests a possible new phase of ice [J]. *Physical review Letters*, 2005, 94: 025502.
- [15] MAO W L, MAO N K, CAI Y Q, et al. X-ray induced dissociation of water and formation of an H₂-O₂ alloy at high pressure [J]. *Science*, 2006, 314 (5799): 636-638.
- [16] FOLLER C C, BARGER J R, WEBB S M, et al. Determination of uranyl incorporation into biogenic manganese oxides using X-ray absorption spectroscopy and scattering [J]. *Environ Sci Technol*, 2002, 40: 774-777.
- [17] SCHLOTTER W F, RICK R, CHEN K, et al. Multiple reference fourier transform holography [J]. *Applied physics letter*, 89(16): 163 112.
- [18] LIU Z, MEHTA A, TAMARA N, et al. Influence of Taoism on the invention of the purple pigment used on the Qin terracotta warriors [J]. *J Archaeol Sci*, 2007, doi: 10. 1016/j. jas. 2007. 01. 005.

A Summary of synchrotron radiation source and its application research

ZENG Zhao-quan

(Center of Experimental, Yunnan University, Kunming 650091, China)

Abstract: The history of SRS development is looked back briefly at first, then frequency characters, basic structure, experiment methods and science highlights of SRS are given in some detail.

Key words: synchrotron radiation source; application research; frequency characters; SRS structure