# 不同晶体模型的微波布拉格衍射

## 郑 航,吴奕初,杨 薇,刘海林,李美亚

(武汉大学物理科学与技术学院,湖北武汉 430072)

摘 要:研究了不同晶体模型下布拉格衍射规律,讨论了简单立方(100)晶面微波衍射图出现 2 级衍射和 3 级衍射 所需的条件.将简单立方模型改造成四方模型,讨论了四方晶体模型的衍射峰随晶面间距的变化规律.设计了体心和底 心立方模型,并观察到了(100)晶面的消光现象.采用有限点阵理论模拟计算结果也与实验测量数据一致.

关键词:微波;布拉格衍射;晶体模型;晶面间距

中图分类号:O436.1 文献标识码:A 文章编号:1005-4642(2017)03-0006-05

微波光学与布拉格衍射是近代物理实验的重要内容<sup>[1]</sup>. X 射线布拉格衍射实验,技术含量高, 自动化程度高,但也存在不足:成本高,学生的参 与度低,对实验仪器各部件了解不足<sup>[2]</sup>.而在微 波布拉格衍射实验中,3 cm 固态微波源易获取, 模拟晶体结构可调节,整个仪器结构组成简单. 微波波长在 0.001~1 m 之间,X 射线波长介于 0.001~10 nm 之间,微波的波长远大于 X 射线, 用微波模拟 X 射线的布拉格衍射实验,可以得到 肉眼可视的模拟晶格,即将现象从微观尺度放大 到宏观尺度.因此有利于学生对 X 射线在实际晶 体布拉格衍射的了解和认知.

早在 1981 年天津大学的应广寿等<sup>[3]</sup> 使用向 量叠加的办法,推出了布拉格衍射峰的位置并解 释了衍射图中次级峰出现的原因. 俞书乐等<sup>[4]</sup> 制 作了底心立方模型,观察到消光现象. 2006 年 起,可检索到国内刊物发表的微波单缝及布拉格 衍射相关论文有十余篇,例如,文献[5]证明了入 射波一定时衍射极大由晶面间距决定;文献[6]介 绍了微波单缝衍射实验中出现的畸变现象;文献 [7]设计了线阵模拟晶体,能有效地调节晶面间 距;文献[8-9]讨论了布拉格定律的衍射级数与微 波波长的关系及实验测量系统的改进. 柳艳 等<sup>[10]</sup>测量发现体心立方的衍射峰强度比简单立 方的衍射峰强度明显增加,但文献中未给出模拟 晶体的点阵参量及各晶面如何同时测量等细节;

收稿日期:2016-07-04

刘强春等<sup>[11]</sup>改变模拟晶体的实际位置,研究了模 拟晶体位置对布拉格衍射峰位置的影响. 另外, 文献检索发现国外学者也对微波布拉格实验进行 了深入研究或对仪器设备进行了改进,值得国内 同行参考和借鉴,相关内容可参考文献[12-14].

考虑到简单立方结构的晶体非常罕见,本文 在研究简单立方模型的基础上,进一步探讨四方、 体心立方及底心立方等不同晶体模型的微波布拉 格衍射实验.实验中观察到了体心立方和底心立 方模型(100)面的消光现象,并在向量模拟方法确 定衍射峰的位置<sup>[3]</sup>基础上,推导了多层晶体的模 拟公式.

## 1 实验原理及方法

### 1.1 微波布拉格衍射实验原理

在微波布拉格衍射实验中,仿照 X 射线衍射 与真实晶体的相互作用关系,以微波代替 X 射 线,以晶格常量与微波波长相近的模拟晶体代替 真实晶体,用微波照射模拟晶体,得出从不同晶面 的格点上反射的微波产生干涉应该具有的条件, 即布拉格衍射条件:

$$2d\sin\theta = n\lambda, \ n = 1, 2, \cdots, \tag{1}$$

其中,d为面间距, $\theta$ 为掠入射角, $\lambda$ 为微波波长,n为衍射级数.

### 1.2 实验仪器和晶体模型

实验采用北京大华无线电仪器厂生产的

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. J1210061);湖北省及武汉大学教学改革研究项目(No. [	
JG201429)	38
作者简介:郑 航(1993一),男,福建平潭人,武汉大学物理科学与技术学院 2012 级本科生.	E
通信作者:吴奕初(1964一),男,福建上杭人,武汉大学物理科学与技术学院教授,博士,主要从事正电 🚆	4
子湮没技术在材料科学中的应用研究和近代物理实验教学工作.	

DHMS-1 微波分光仪. 3 cm 固态微波发射源提 供波源,它是由固态信号发生器生成与所需微波 频率相同的电流,而后由喇叭口天线发出具有平 面波面的微波,经过中间的实验仪器后,到达接收 喇叭天线再将微波强度信号转变成电流信号,电 流信号由微安表读出.

点阵常量为 4 cm 简单立方模型由  $5 \times 5 \times 5$ 共 125 颗小金属球组成,将每条横线上的小球等 间距排列好,前后上下一致,可以逐层调节,先粗 调后细调.四方模型实际就是原来的简单立方模 型,调节微波入射方向的(100)晶面间距,由简立 方调节成四方( $a \neq b = c$ ),a 可以 2~5 cm 变化, b = c = 4 cm 保持不变.体心立方和底心立方模型 是在 4 cm 简单立方模型的基础上添加位于体心 64 颗金属球或底心的 80 颗金属球.实验中采用 9 mm 尼龙线作连接线,白色棉线用于给小球提 供足够的摩擦力使之不易滑动,在木框架打孔,用 于给位于体心的金属球提供连接线固定位置,最 后组装成点阵常量为 4 cm 体心立方和底心立方 模型.

## 2 实验探究

### 2.1 简单立方的峰位模拟和实验检验

简单立方的模拟晶体的晶格常量 a=4 cm, 微波源波长 3 cm 固定不变.在测定(100)晶面的 衍射强度分布图时,选取合理的入射角 20°~70°, 法线和入射角组成的平面与(100)晶面相互垂直, 且法线始终在另一个与被测(100)晶面相互垂直 的(010)面内,测量(100)面随掠入射角  $\theta$  变化的 衍射波强度,可得到(100)面和(200)面的衍射峰. 同样(110)面和(120)面与(100)面存在固定夹角, 只是比(100)面的操作多一步,即事先转动固定的 角度差.对于简单立方(110)面,固定角度差是 45°,(120)面与(100)面的固定角度差是25.6°.

对于晶格上的同一层面的格子在波阵面为平面波面的微波入射后的反射波是同相位的,而紧相邻层面的格子的反射波有固定相位差: $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{2d\sin\theta}{\lambda}$ ,其中 $\theta$ 是掠入射角,d是面间距.以(100)晶面为例,晶面有5层,每层的反射波振幅矢量为 $A_i$ ,i=1,2,3,4,5.矢量的模相同,但相位相继落后 $\varphi$ ,A是合振幅,如图1所示.

$$\mathbf{A}_{1} = \cos 2\varphi, \mathbf{A}_{2} = \cos \varphi, \mathbf{A}_{3} = 1,$$
  
$$\mathbf{A}_{4} = \cos (-\varphi), \mathbf{A}_{5} = \cos (-2\varphi), \quad (2)$$

合向量为

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \left( 1 + 2\cos 2\varphi + 2\cos \varphi \right), \qquad (3)$$

强度正比于振幅的平方值,因此

$$I = I_0 (1 + 2\cos 2\varphi + 2\cos \varphi)^2.$$
 (4)



图 1 矢量合成示意图

实验中,简单立方的(100)面的1级衍射强于 2级衍射,是因为微波在晶面间进行了多次衍射, 最后结果是多次衍射结果的叠加.列出前5层的 晶体模型的模拟公式组:

$$\begin{cases} I_{1} = I_{0}, I_{2} = I_{0} (2\cos 0.5\varphi)^{2}, I_{3} = I_{0} (1+2\cos \varphi)^{2} \\ I_{4} = I_{0} (2\cos 1.5\varphi + 2\cos 0.5\varphi)^{2}, \\ I_{5} = I_{0} (1+2\cos 2\varphi + 2\cos \varphi)^{2}. \end{cases}$$
(5)

实际上,由 125 颗金属球构成的  $5 \times 5 \times 5$  晶 体模型包含着  $4 \times 4 \times 4$  晶体模型、 $3 \times 3 \times 3$  晶体 模型、 $2 \times 2 \times 2$  晶体模型和 1 个小球晶体模型,其 衍射图中必然有这些晶体模型的组分.取各组分 的比例因数均为 0.5,各层的向量如上,则总合向 量为

$$5\cos 1.5\varphi + 6.25\cos 0.5\varphi)^2, \frac{\varphi}{2\pi} = \frac{2a\sin\theta}{\lambda}.$$

同理,得到简立方(110)和(120)晶面衍射强度模 拟公式:  $I_{(110)} = I_0 (8.062 5 + 2\cos 4\varphi + 5\cos 3\varphi +$ 

8. 5cos 
$$2\varphi$$
+12. 25cos  $\varphi$ )<sup>2</sup>,  $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{2a\sin\theta}{\sqrt{2\lambda}}$ .  
(9)

$$I_{(120)} = I_0 (A+B)^2, \ \frac{\varphi}{2\pi} = \frac{2a\sin\theta}{\sqrt{5}\lambda}, \ (10)$$

$$A=3.3125+2\cos 6\varphi+2\cos 5\varphi+\cos 4.5\varphi+$$
$$4\cos 4\varphi+4.5\cos 3\varphi+\cos 3\varphi,$$

 $B = 2\cos 2.5\varphi + 6.5\cos 2\varphi + 6\cos \varphi +$ 

2. 25 cos 1.  $5\varphi$ +2. 25 cos 0.  $5\varphi$ .

由以上公式绘图,取 $\theta$ 为 20° $\sim$ 70°,就可得到简立 方 3 个主要晶面模拟图.

图 2 给出了 4 cm 简立方 3 个主要晶面 (100),(110)和(120)衍射的模拟图与实验图.通 过比较模拟和实测结果可以发现(100)面的衍射 峰和(200)面的衍射峰的位置合理,并且 2 个峰的 强度也比较合理. 然而(100)面强度明显大于 (200),是因为散射波在反射路程中部分被其他金 属球再次散射到其他方向,路程越远,强度越小. 这说明微波在晶格中衍射有多次散射,最终结果 是多次散射的复合结果. (110)面的衍射峰的峰 位在32°,(120)面的衍射峰的峰位在57°,拟合比 较好,对次级峰的拟合也比较好.次级峰是由各 晶面的子散射波叠加而来的,可以由拟合式(8)~ (10)计算出.目前理论模拟图中的各曲线可解释 各晶面的多次衍射强度相对强弱及次级峰出现位 置,但各晶面的衍射峰相对强弱取决于晶体模型 的大小、点阵金属球数以及晶面间距等多种因素, 图 2(a)只能给出相对强度的变化趋势.

将晶体的晶格常量增加为 a = 5 cm,取  $\theta$  为 20°~70°,绘出(100)晶面的模拟图和实验图.结 果表明:图 3(a)的 37°和 64°主峰,分别对应(200) 和(300)晶面,图 3(b)在 37°和 62°处出现这 2 个 主峰,分别与它们相对应,在 23°,26°和 30°附近出 现次级峰,而(100)峰位小于 20°,微波可能直射 部分而未被测量到;在 25°和 57°出现 2 个衍射峰, 分别对应(110)和(220)晶面,这与理论值的 25° 和 58°基本吻合.

比较图 2 和图 3,可观察到晶面间距变大衍 射峰向低入射角方向移动;选择较大的晶面间距 (如 5 cm),可观察到(100)晶面的 2 级和 3 级衍 射峰,及(110)晶面的 1 级和 2 级衍射峰.采用有 限点阵向量叠加模拟结果与实验数据一致,可解 释相对衍射峰的强度变化和次级峰出现的位置.

110





#### 2.2 四方模拟晶体峰位变化规律

在本次实验中,波长不变,模拟点阵可以由简 立方调节成四方 $(a \neq b = c)$ ,a 可以从 1~5 cm 变 化. 当 a 较小时,小球大小不可忽略,在间距 a 大 于小球的直径 2 cm 时,测量误差较小. 模拟晶体 在水平面中的面指数表示为(hk0),则面间距可 表示为

$$d = 1 \left| \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}}, \right|$$
(11)

代入布拉格公式,得到:

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2} \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{16}}$$
,  $n = 1, 2, \cdots$ . (12)

实验中 $\theta$ 角从 20°开始,到仪器极限 74°,因此 0.34 $\leqslant$ sin  $\theta \leqslant$ 0.96.

 $\exists n=1, \lambda=3$ 时,对于四方晶体的间距为a

的(100)面,计算可得 1.56 $\leqslant a$  $\leqslant$ 4.39,在此范围 内可以得到(100)晶面的衍射峰;对于(110)晶面, 要想看到峰,则 a $\geqslant$ 1.70;同样,对于(120)晶面, 1.59 $\leqslant$ a $\leqslant$ 5.25;对于(210)晶面,a $\geqslant$ 0.42.

当  $n=2,\lambda=3$  时,对于四方晶体的间距为 a的(200)面,计算可得  $3.12 \le a \le 8.77$ ;对于(220) 晶面,要想看到峰,则  $3.58 \le a \le 6.23$ . 同样,对于 (240)晶面, $a \ge 3.40$ ;对于(420)晶面, $a \ge 1.25$ .

当  $n=3,\lambda=3$  时,对于四方晶体的间距为 a的(300)面,计算可得 4.68 $\leqslant a \leqslant 13$ .19;对于 (330)晶面,没有合理范围,所以在本次实验不可 能找到(330)的衍射峰.事实上,如果晶面间距太 大,衍射峰强度太弱,实验上也观察不到.

结合 2《a《5,获得本次实验可以得到的衍 射峰和四方晶体中可变值 *a* 的允许范围见表 1.

表1 四方晶体中点阵参量 a 的允许范围

п	$a/\mathrm{cm}$				
	(100)	(110)	(120)	(210)	
1	[2.00,4.39]	[2.00,5.00]	[2.00,5.00]	[2.00,5.00]	
2	[3.12,5.00]	[3.58,5.00]	[3.40,5.00]	[2.00,5.00]	
3	[4.68,5.00]	_	_	_	

由表 1 可得出,当 2.00 $\leqslant a \leqslant 3.12$  时,可测得 的衍射峰有(100),(010),(110),(110),(120), (210),(120),(210),共 8 个晶面;当 3.12 $\leqslant a \leqslant$ 3.40,则可以得到(200)晶面的衍射峰;当 3.40 $\leqslant$  $a \leqslant 4.39$ ,则可以得到(420)晶面的衍射峰;而当  $a \geqslant 4.39$  时,(100)晶面的衍射峰将不在 20°~70° 间而消失.以此类推.而实际上,(100)和(010), (020)和(200),(120)和(210)都互为不等效晶面, 并且 2 次及 3 次衍射均建立在 1 次衍射成功之 后,衍射强度随级数变大而降低,但大致正比于 1 次衍射.

对比 a=3.5 cm 的四方模型的(100),(110) 晶面,a=4.0 cm 的四方(简立方)模型的峰位发 生移动.对于 a=4.8 cm 的四方的(100)晶面出 现 2 次与 3 次衍射,衍射强度分布图在 39°和 70°, 分别是(200)面和(300)面的峰位.作 3 种四方模 型的峰位比较图 4,可发现(100)晶面和(200)晶 面的衍射峰随间距变大而向低掠入射角方向移 动,因为 2 级峰在 1 级峰后侧,所以间距增大到一 定程度时,(100)衍射峰会先行移出 20°角外侧而 消失. 类似地,四方晶体模型(110)晶面的衍射峰 随间距变大而也向低掠入射角移动,而在 3 种四 方晶体模型中(010)的峰位始终不变,保持在  $22^{\circ}$ 位置,因为 b=4 cm,(010)晶面间距保持不变.





## 2.3 体心立方和底心立方的衍射强度分布和消 光现象

由固体物理学基础知识可知<sup>[15]</sup>,对于体心立 方结构,晶胞中的2个相同的原子位于(0,0,0)和 (0.5,0.5,0.5),则衍射波的强度可表示为  $I_{mh,mk,ml} \propto f^2 [1 + \cos \pi (nh + nk + nl)]^2 + f^2 [\sin \pi (nh + nk + nl)]^2.$  (13)

式中 f 是散射因子,n 是衍射级数. (13)式表明, 衍射图中找不到衍射面指数和(nh+nk+nl)为奇 数的衍射斑,故(100)的峰位将消失或被有效减弱.

同理,对于底心立方结构,晶胞中的2个相同 的原子位于(0,0,0)和(0.5,0.5,0),则衍射波的 强度可表示为

$$I_{mh,mk,ml} \propto f^2 [1 + \cos \pi (nh + nk)]^2 + f^2 [\sin \pi (nh + nk)]^2.$$
(14)

(14) 式表明: 衍射图中找不到衍射面指数和 (*nh*+*nk*)为奇数的衍射斑, 故其(100)的峰位也 将消失或被有效减弱.

图 5 给出点阵常量为 4 cm 的简单立方、体心 立方和底心立方 3 种不同晶体模型(100)面衍射 强度分布.从图中可以看出,对比简单立方,体心 立方衍射图中原有的(100)晶面衍射峰被消光,而 (200)晶面衍射峰仍存在,并且比简单立方的更 陡,微波的散射波更强,这符合体心立方模型的 (200)面的层数以及体心立方模型中参与衍射的 金属球都多于简单立方的实验事实.



图 5 简立方、体心立方和底心立方(100)面衍射峰比较

同样,底心立方的(100)衍射强度分布类似于 体心立方,在其衍射图中(200)晶面的峰位在 49°,而(100)面由于被消光而未出现.另外,实验 也证实(110)晶面衍射峰未出现消光,且观察到 (120)晶面也存在消光现象.

3 结 论

立方晶体实验满足布拉格衍射规律,晶面间 距变大衍射峰向低入射角方向移动;选择较大的 晶面间距(如 5 cm),可观察到(100)晶面的 2 级 和 3 级衍射峰,以及(110)晶面的 1 级和 2 级衍射 峰.采用有限点阵向量叠加模拟计算结果也与实 验测量数据一致,可解释相对衍射峰的强度变化 和次级峰出现的位置.四方晶体比简单立方更复 杂,详细分析了四方晶体模型不同晶面的衍射峰 随晶面间距的变化规律,并示例实验证实四方与 简单立方的异同.体心立方和底心立方模型的衍 射实验中观察到衍射消光现象,即(100)晶面的衍 射峰被明显减弱.揭示了微波布拉格衍射中随着 晶体结构类型和结构参量变化而引起的衍射峰强 度和位置的变化.

## 参考文献:

- [1] 吴思诚,王祖铨.近代物理实验[M].北京:高等教 育出版社,2005:292-297.
- [2] 吕蓬,廖坤山,陈宏斌.布拉格衍射实验的类比教学 研究[J].淮北师范大学学报(自然科学版),2014, 35(4):84-87.
- [3] 应广寿,李华,肖家鑫,等.用微波的布拉格衍射测 定模拟晶体的晶格常数实验简介[J].物理实验, 1981,1(2):41-44,69.
- [4] 俞书乐,汪家友. 微波布拉格衍射实验内容的扩充 和设备的改进[J]. 物理实验,1987,7(6):241-243.
- [5] 康伟芳,薛玉春,刘帅.布拉格衍射及其应用[J].大学物理实验,2006,19(2):11-14.
- [6] 霍伟刚,程世红,王秋薇. 微波单缝衍射实验中的畸 变现象研究[J]. 物理实验,2008,28(9):1-4.
- [7] 侯林利,章志敏,周小红,等.一种新型模拟晶体的 设计[J].大学物理实验,2010,23(2):12-15.
- [8] 何颖卓,李春芝.微波布拉格衍射实验中测量衍射
   极大值的新方法[J].大学物理实验,2013,26(5):
   9-12.
- [9] 徐春阳,陈文婷,王晓栋,等. 微波布拉格衍射中立 方晶体晶面衍射测量与模型选取讨论[J]. 物理实 验,2014,34(10):45-48.
- [10] 柳艳,王旗,朱盼盼,等.简立方晶体与体心立方晶体的微波布拉格衍射比较[J].大学物理实验, 2013,26(增):4-5.
- [11] 刘强春,花宁,尹新国. 微波布拉格衍射实验中模 拟晶体位置选取的讨论[J]. 吉林师范大学学报 (自然科学版),2006(1):78-80.
- [12] Cornick M T, Field S B. Microwave Bragg diffraction in a model crystal lattice for the undergraduate laboratory [J]. American Journal of Physics, 2004,72(2):154-158. (下转第 14 页)

# Verifying the perpendicular axis theorem of rotational inertia of rigid body using a constant-torque rotational method

WANG Jin-hui, HE Li-rong, YANG Wen-ming, ZHOU Hong, WANG Yu-xing (Department of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The moment of inertia of a self-made stainless sheet with rectangle shape had been measured using a constant-torque rotational method. The experimental data were  $7.70 \times 10^{-4}$  kg  $\cdot$  m<sup>2</sup> and  $3.23 \times 10^{-3}$  kg  $\cdot$  m<sup>2</sup> for the rotational axis parallel to long and short edge of sheet, respectively, and  $3.97 \times 10^{3}$  kg  $\cdot$  m<sup>2</sup> for the rotation axis vertical to the surface of plate. The sum of the moment of inertia along the long and short edge of the sheet was approximately equal to that along the surface normal of the sheet. The relative error was about 0.84%, perfectly proved the perpendicular axis theorem. It was also shown that the improvement of the moment of inertia by considering the thickness of the sheet was less than 5%, then it was reasonable to omit the effect of thickness. The experimental results indicated the screws and dowel pin played no important role. Moreover, the effects of air damping, radius of cone pulley and mass of weights were discussed.

Key words: rigid body; moment of inertia; constant-torque rotational method; perpendicular axis theorem

## [责任编辑:尹冬梅]

### (上接第10页)

- [13] Amato J C, Williams R E. Rotating crystal microwave Bragg diffraction apparatus [J]. American Journal of Physics, 2009,77(10):942-945.
- [14] Yuan C P, Lin S Y, Chang T H, et al. Millime-

ter-wave Bragg diffraction of microfabricated crystal structures [J]. American Journal of Physics, 2011,79(6):619-623.

[15] 陆栋,蒋平,徐至中. 固体物理学[M]. 上海:上海 科学技术出版社,2010:7-8.

## Microwave Bragg diffraction of different macroscopic crystal models

ZHENG Hang, WU Yi-chu, YANG Wei, LIU Hai-lin, LI Mei-ya (Experiment Teaching Center for Physics, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: The rules of microwave Bragg diffraction under different macroscopic crystal models were investigated. Experimental results showed that 2nd- and 3rd-order diffraction peaks appeared in simple cubic (100) plane when choosing larger plane spacing (e. g 5 cm). The relationship between the position of diffraction peaks and the spacing of different crystal planes was analyzed by adjusting simple cubic model into tetragonal crystal model. Both body-centered and base-centered cubic models were exquisitely designed and constructed, the extinction phenomenon of the (100) crystal plane was observed. Finally, the results simulated by the interference of the scattered waves from limited lattice points were in good agreement with the measured data.

Key words: microwave; Bragg diffraction; crystal model; plane spacing

[责任编辑:任德香]