

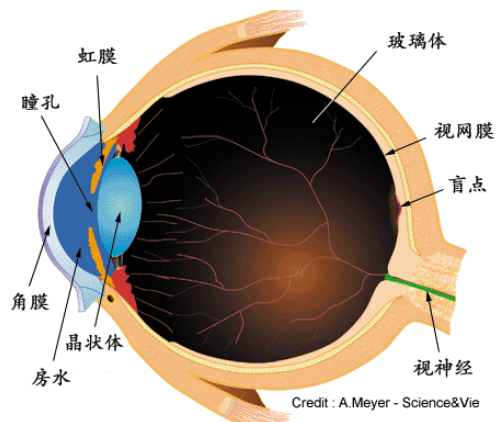
第四章 光的衍射

前言

- 1、 惠更斯-菲涅耳原理
- 2、 圆孔和圆屏菲涅耳衍射、波带片
- 3、 夫琅禾费单缝衍射
- 4、 夫琅禾费圆孔衍射和光学仪器的分辨本领
- 5、 位移-相移定理
- 6、 一维光栅、二维光栅
- 7、 三维光栅—X射线晶体衍射

4、夫琅禾费圆孔衍射和光学仪器的分辨本领 (*)

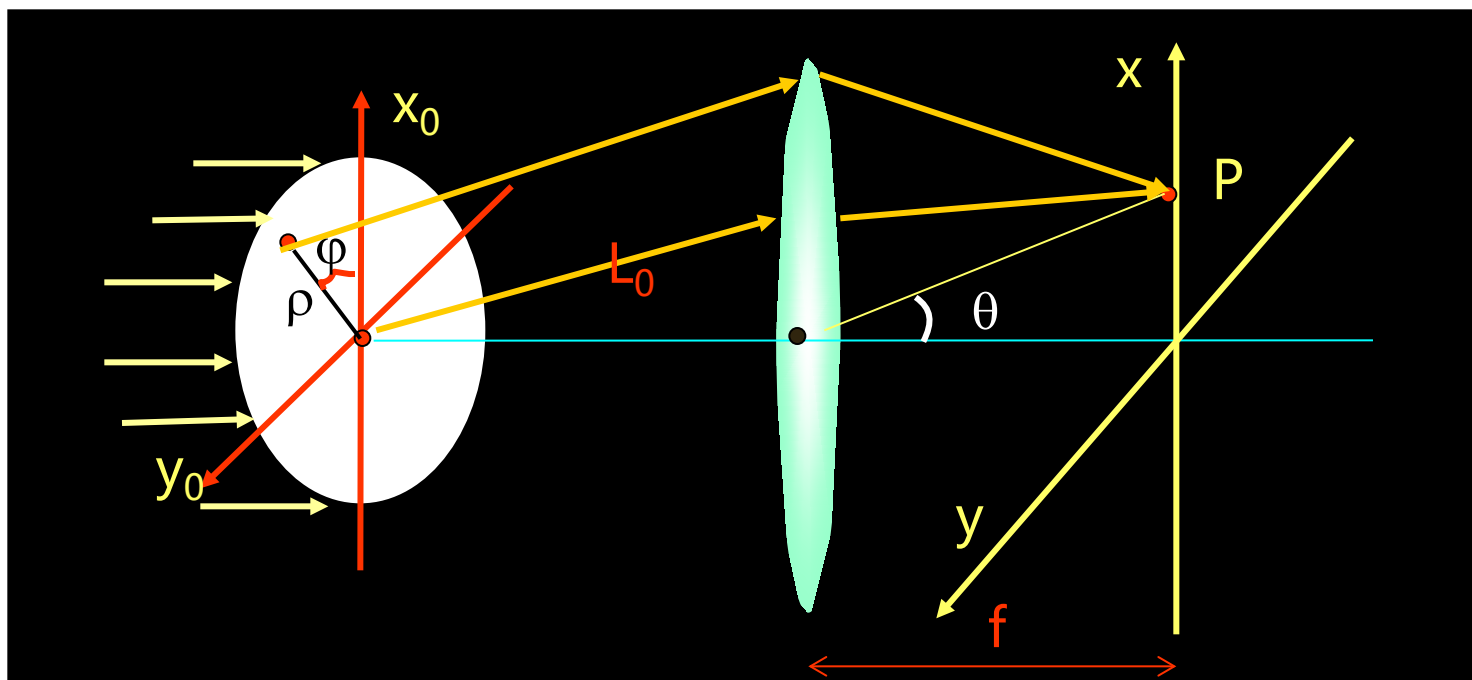
光学仪器的光瞳通常是圆形的，所以讨论圆孔衍射对于分析光学仪器的衍射现象有着特别重要的意义。



Credit : A.Meyer - Science&Vie



4、夫琅禾费圆孔衍射和光学仪器的分辨本领



$$\tilde{U}(\theta) = \frac{-i}{\lambda} \iint_{\Sigma_0} \frac{(\cos \theta_0 + \cos \theta)}{2} \tilde{U}_0(Q) \frac{e^{ikr}}{r} dS \quad \text{衍射图样的积分法求解}$$

$$dS = \rho d\phi d\rho, \quad \tilde{U}_0(Q) = A, \quad \text{在傍轴条件下, } f(\theta_0, \theta) \approx 1,$$

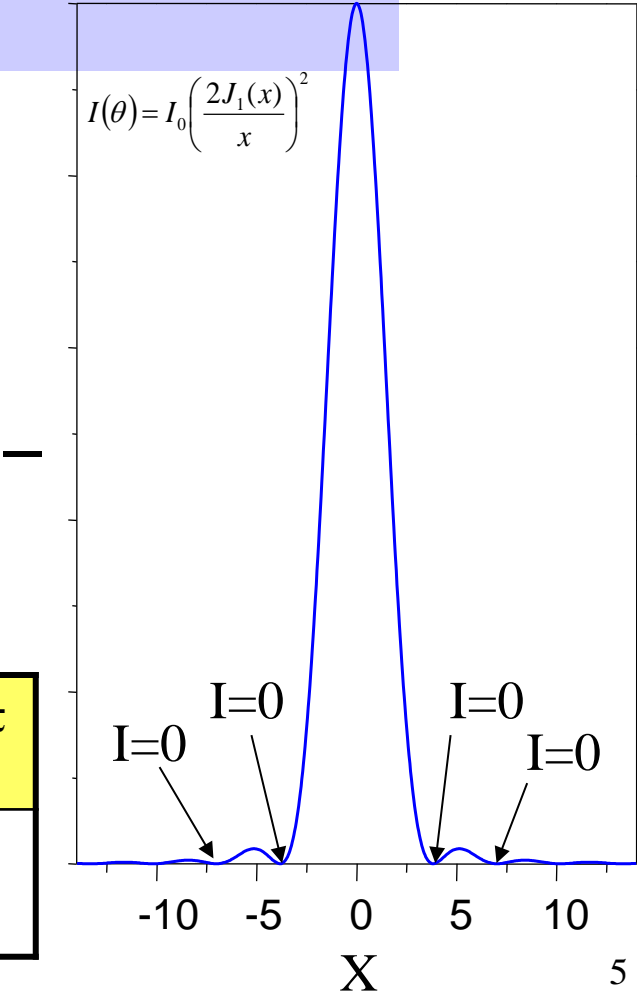
$$\text{振幅系数 } \frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r_0} \xrightarrow{\text{经透镜变换}} \frac{1}{f}$$

$$\text{相因子 } e^{ikr}, \quad kr = kL = -k\rho \cos \varphi \sin \theta + kL_0$$

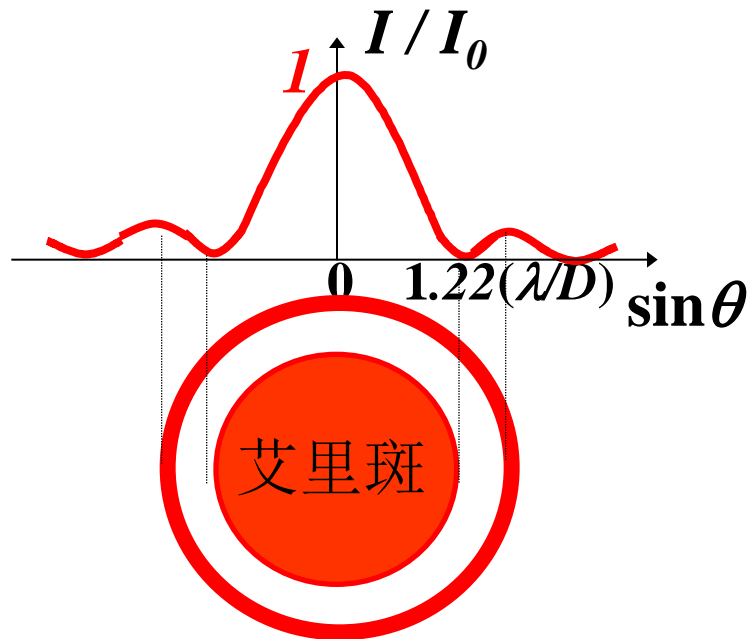
$$\begin{aligned}\tilde{U}(\theta) &= \frac{-i}{\lambda f} A e^{ikL_0} \int_0^R \int_0^{2\pi} e^{-k\rho \cos\varphi \sin\theta} \rho d\varphi d\rho \\ &= \frac{-i}{\lambda f} A \pi R^2 e^{ikL_0} \left[\frac{2J_1\left(\frac{2\pi R \sin\theta}{\lambda}\right)}{\frac{2\pi R \sin\theta}{\lambda}} \right]; \text{ 其中 } J_1 \text{ 为一阶贝塞尔函数}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{U}(\theta) &= \tilde{c} \left(\frac{2J_1(x)}{x} \right), \\ \text{其中 } \tilde{c} &= \frac{-i}{\lambda f} A \pi R^2 e^{ikL_0}, \quad x = \frac{2\pi R \sin\theta}{\lambda}, \\ I(\theta) &= \tilde{U}(\theta) \tilde{U}^*(\theta) = I_0 \left(\frac{2J_1(x)}{x} \right)^2\end{aligned}$$

x	0	1.22π	1.64π	2.23π	2.68π	3.24π
$I(\theta)=I_0\left(\frac{2J_1(x)}{x}\right)^2$	1	0	0.017	0	0.004	0



光强曲线



衍射图案

第一个暗环的方位角 θ_0 为：

$$x = \frac{2\pi R \sin \theta_0}{\lambda} = 1.22\pi \Rightarrow \sin \theta_0 = 1.22 \frac{\lambda}{D}, \quad D = 2R \text{ 为圆孔直径。}$$

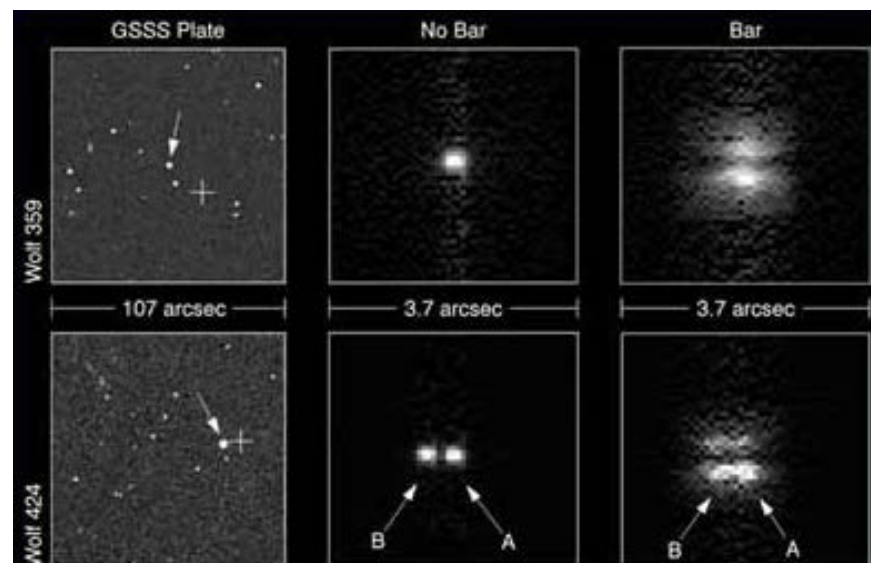
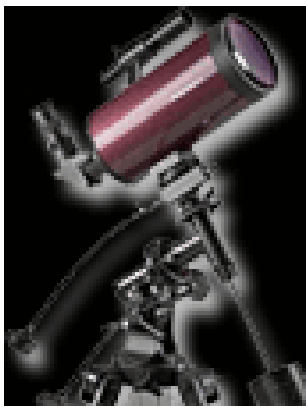
艾里斑的半角宽度 $\Delta\theta_0$ 体现了圆孔衍射效应的强弱程度，由上式得：

$$\Delta\theta_0 \approx 1.22 \frac{\lambda}{D}, \quad \text{或} \quad D \cdot \Delta\theta_0 \approx 1.22\lambda$$

它和单缝和矩形孔的衍射反比律公式一致，只是系数有差别。

光学仪器的分辨本领

分辨本领是一个复杂的问题，它涉及到几何光学系统的种种相差和缺欠，涉及到被分辨物点的亮度和其他一些性质。我们现在考虑理想的分辨本领，即两个亮度相同、波长相等的独立光源经过光学系统所能达到的最佳分辨本领，也就是光学仪器的分辨本领的衍射极限。

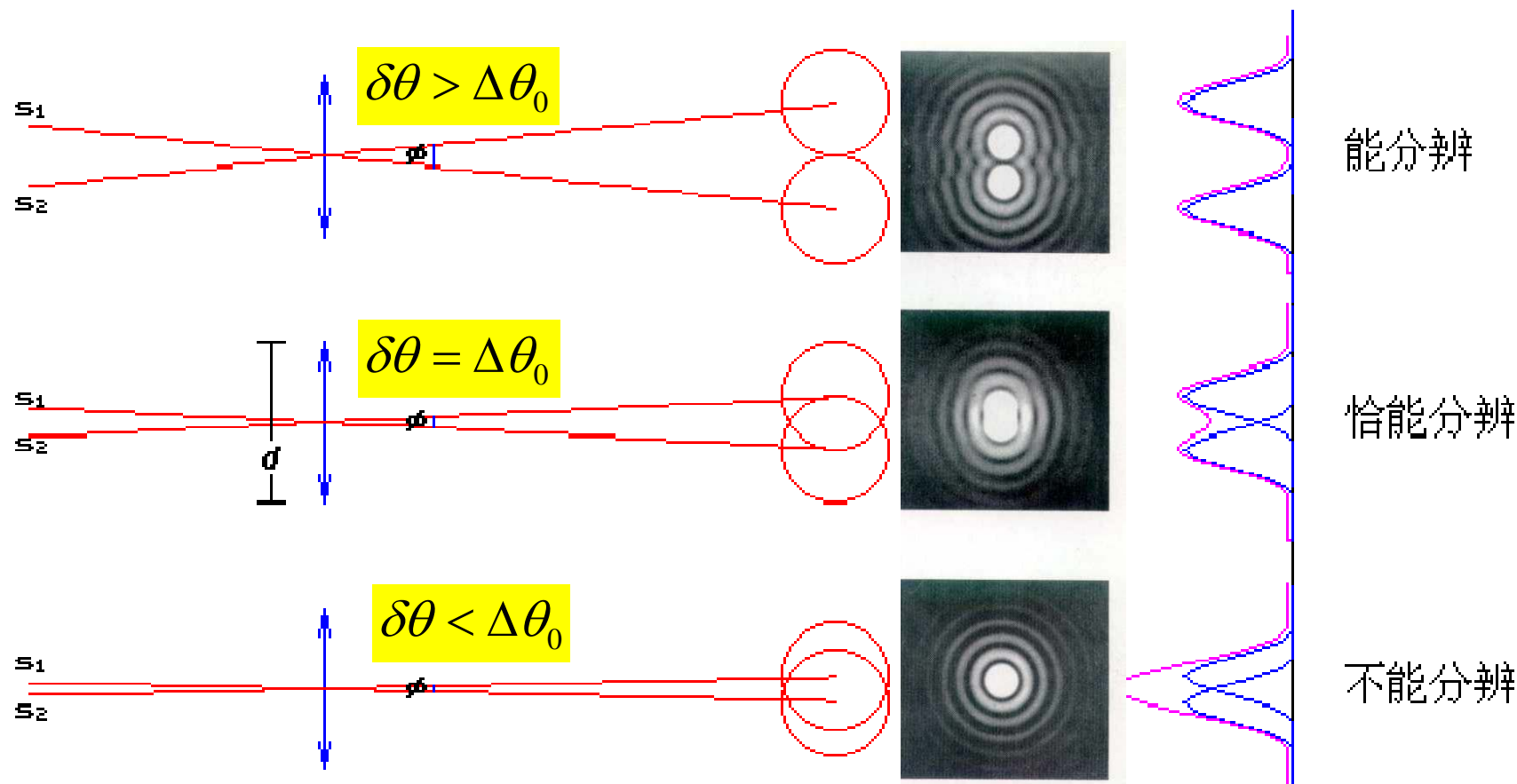


几何光学：物点 \Rightarrow 像点

物(物点集合) \Rightarrow 像(像点集合)

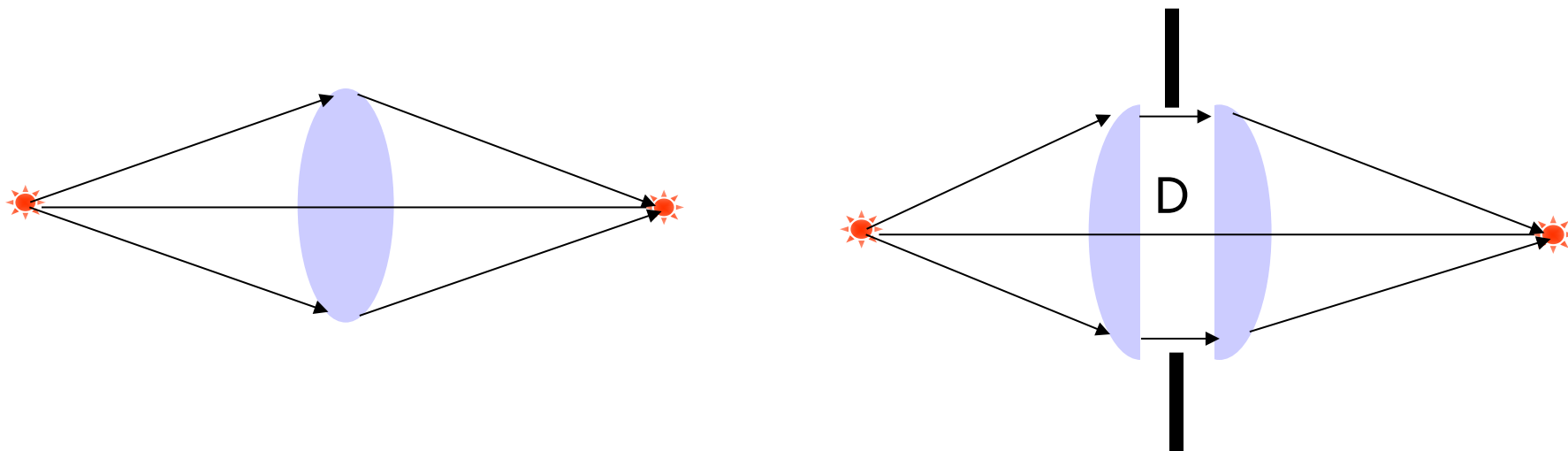
波动光学：物点 \Rightarrow 像斑

物(物点集合) \Rightarrow 像(像斑集合)



瑞利判据： 两个物点反应在像面上有两个艾里斑，设两物点的夹角或两艾里斑中心的夹角为 $\delta\theta$ ，每个艾里斑自身的半角宽度为 $\Delta\theta_0$ ，瑞利判据是：
当 $\delta\theta > \Delta\theta_0$ 时，可分辨； 当 $\delta\theta < \Delta\theta_0$ 时，不可分辨；
当 $\delta\theta = \Delta\theta_0$ 时，给出可分辨的最小角度-- $\delta\theta_m$

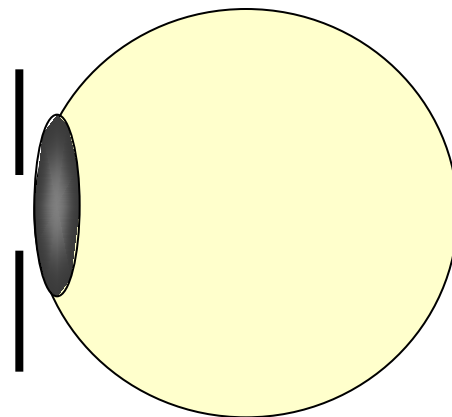
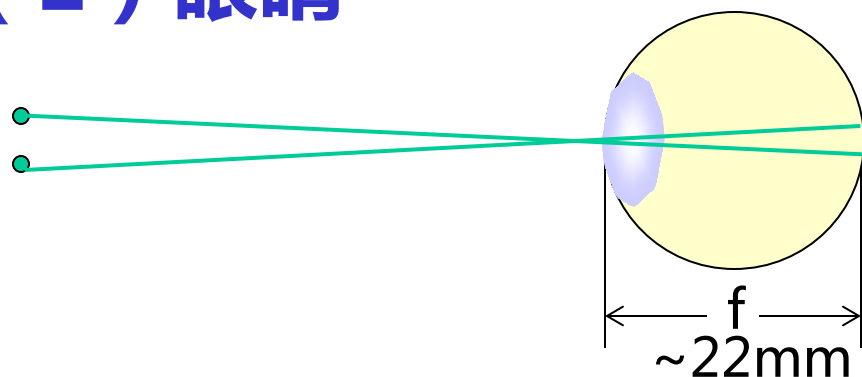
夫琅和费衍射存在于一切有限孔径的成像系统中



夫琅禾费圆孔衍射是一个在一切使用透镜的光学系统中普遍存在的现象，因为任何一个单透镜成像，都可以看成两个透镜加上一个光阑的组合。因此几何像点实际上是有一定半径的艾里斑，这种情况就产生了一个问题，即两个像斑可能发生重叠，重叠到一定程度，就无法分辨。这就是仪器的分辨本领问题。

以下分析几种典型的光学装置

(1) 眼睛



决定眼睛分辨本领的是瞳孔的直径 D_e , D_e 白昼小, 黑夜大
正常范围在2 ~ 8 mm。分析白昼时, 人眼的分辨本领为 $\delta\theta_e$ 。

$$\lambda \sim 550nm, D_e \sim 2mm$$

$$\delta\theta_e = 1.22 \frac{\lambda}{D_e} = 1.22 \times \frac{550nm}{2mm} \approx \underline{3.3 \times 10^{-4} rad} \approx 1' \quad \text{最小分辨角}$$

正常人的明视距离为25cm, 在明视距离处, 人可分辨:

$$\delta y_e = l \cdot \delta\theta_e = 25cm \times 3.3 \times 10^{-4} rad = 0.08mm$$

$$\text{人眼在10m处的分辨本领: } \delta y_e = l \cdot \delta\theta_e = 10m \times 3.3 \times 10^{-4} rad = 3.3mm$$

*估算眼睛的感光细胞密度

$\lambda \sim 550nm$, 在黑夜 $D_e \sim 8mm$, 晶体折射率 $n \approx 1.3$

$$\delta\theta_e = 1.22 \frac{\lambda}{D_e} = 1.22 \times \frac{550nm}{8mm} \approx 0.8 \times 10^{-4} rad$$

人眼睛焦距, $f \approx 22mm$, 所以:

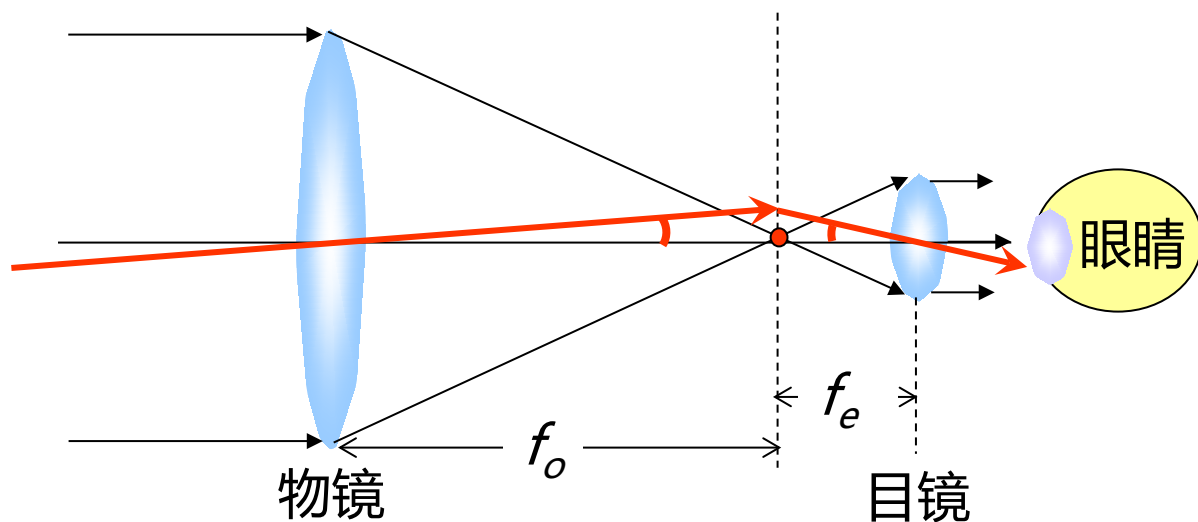
$$d \approx \frac{1}{1.3} \times f \cdot \delta\theta_e = 1.3\mu m, \quad s \approx \pi d^2 \approx 0.35 \times 10^{-6} mm^2$$

则感光细胞的面密度为: $n = \frac{1}{s} \approx 1 \times 10^5 \text{ 个} / mm^2$

视网膜的面积: $S \approx 200mm^2$, 所以人眼视网膜上感光细胞总数为:

$$N = n \cdot S \sim 0.25 \text{ 亿个}$$

(2) 望远镜



望远镜的角放大倍数为：
$$M = \frac{f_o}{f_e}$$

望远镜的**角分辨本领**决定于物镜的口径 D_o ，因为望远镜的孔径光阑是物镜，凡是被物镜接受的正入射宽光束总能全部通过目镜而进入人眼睛，故此望远镜的最小分辨角为：

$$\delta\theta_m \approx 1.22 \frac{\lambda}{D_o}$$

有效放大率：
$$M_{eff} = \frac{\delta\theta_e}{\delta\theta_m}$$

最小分辨角度 $\delta\theta_m$ 经过 M_{eff} 放大恰好等于人眼的分辨角 $\delta\theta_e$ 。

例题：一光学望远镜，物镜的口径 $D_o \sim 2000mm$ ，求它的最小分辨角度和有效放大倍数？

解：

$$\delta\theta_m \approx 1.22 \frac{\lambda}{D_o} = 1.22 \times \frac{550nm}{2000mm} \approx 3.3 \times 10^{-7} \approx 0.001'$$

$$M_{eff} = \frac{\delta\theta_e}{\delta\theta_m} \approx \frac{3.3 \times 10^{-4} rad}{3.3 \times 10^{-7} rad} \approx 10^3 \text{ 倍}$$

对于一个普通双筒望远镜来说，如果镜头的直径是5cm，它可以提供的有效放大倍数在瞳孔2mm时为25倍，4mm时为12.5倍。

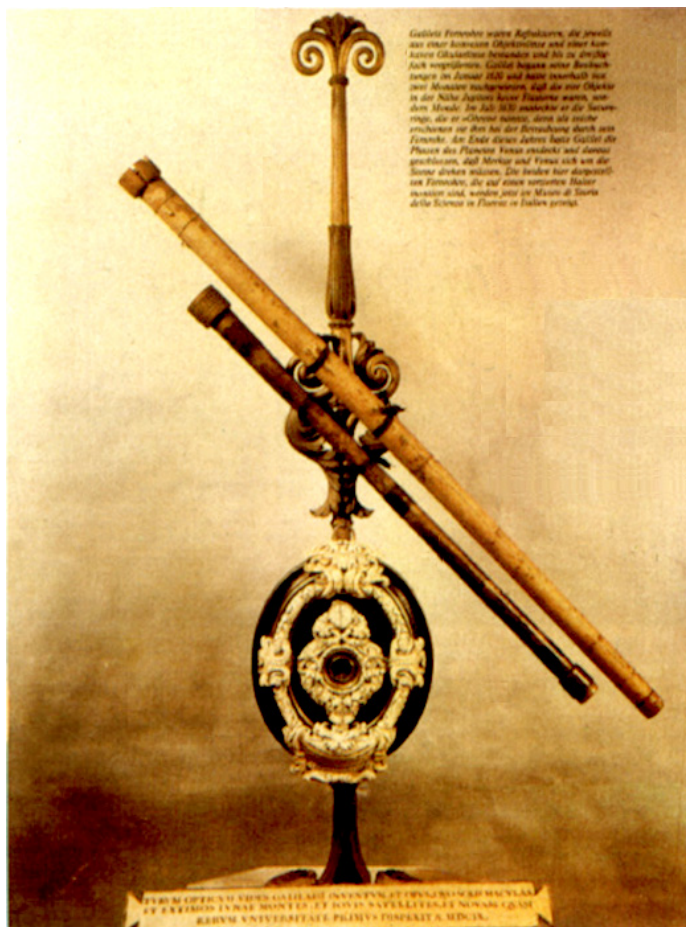
更高的倍数只能使物体看上去更近，但是不能提供更清晰的分辨能力。

衍射效应给光学仪器分辨本领的限制，是不能用提供放大率的办法来克服。

因为增大了放大率之后，虽然放大了像点之间的距离，但每个像的衍射斑也被同样的放大了，光学仪器原来所不能分辨的东西，放得再大，仍不能为我们的眼睛或者照相底片所分辨。

另一方面，如果光学仪器的放大率不足，也可能使仪器已经分辨了的东西由于成像太小，使眼睛或者照相机底片不能分辨。这时，仪器的分辨本领未被充分利用，我们还可以提高它的放大率。

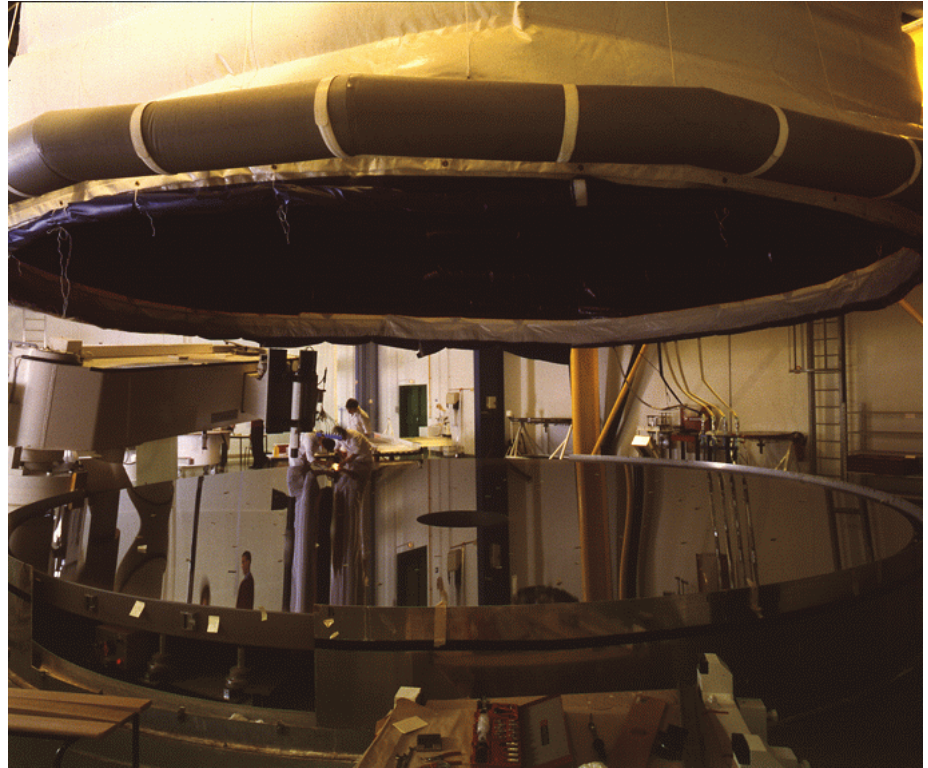
设计一个光学仪器时，应使它的放大率和分辨本领相适应。对于助视光学仪器，最好如此选择其放大率：使得仪器的最小分辨角的角度放大到人眼所能分辨的最小角度（约 $1'$ ）



伽利略望远镜

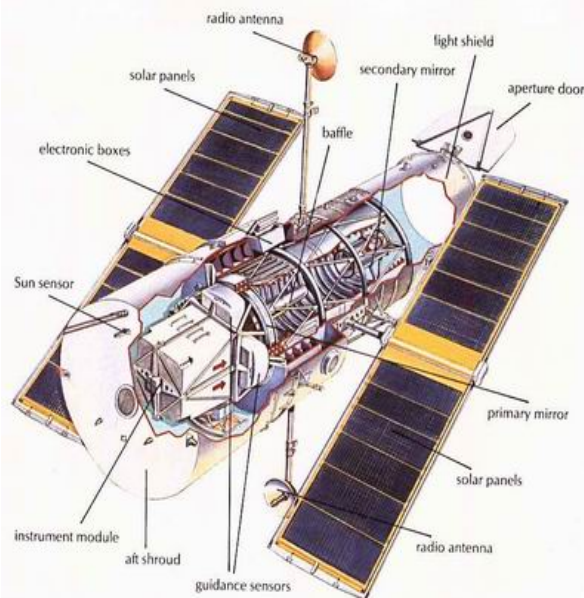


牛顿的反射式望远镜



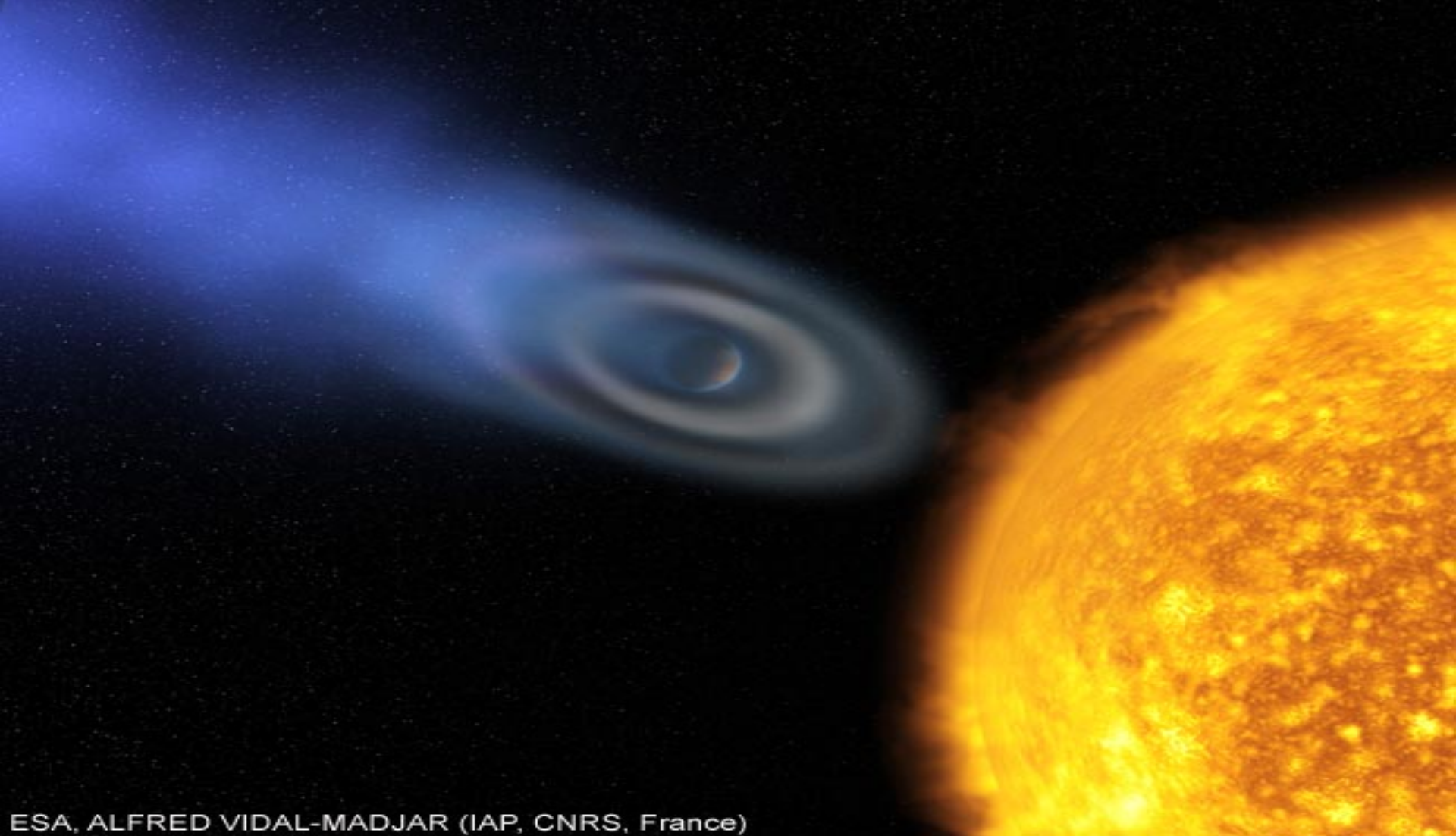
欧洲南方天文台的 VLT 天文望远镜阵列和 VLT 天文望远镜的8.2 米直径的主反射镜。

*哈勃太空望远镜



哈勃号太空望远镜是被送入轨道的口径最大的望远镜(1990年4月24日)。它全长12.8米，镜筒直径4.27米，重11吨，由三大部分组成，第一部分是光学部分，第二部分是科学仪器，第三部分是辅助系统，包括两个长11.8米，宽2.3米，能提供2.4千瓦功率的太阳电池帆板，两个与地面通讯用的抛物面天线。镜筒的前部是光学部分，后部是一个环形舱，在这个舱里面，望远镜主镜的焦平面上安放着一组科学仪器；太阳电池帆板和天线从筒的中间部分伸出。

望远镜的光学部分是整个仪器的核心。它采用卡塞格林式反射系统，由两个双曲面反射镜组成，一个是口径2.4米的主镜、另一个是装在主镜前约4.5米处的副镜，口径0.3米。投射到主镜上的光线首先反射到副镜上，然后再由副镜射向主镜的中心孔，穿过中心孔到达主镜的焦面上形成高质量的图像，供各种科学仪器进行精密处理，得出来的数据通过中继卫星系统发回地面。



科学家利用哈勃太空望远镜发现太阳系外第一颗在大气层中含有水蒸汽、甲烷和二氧化碳的行星。科学家给这颗名叫HD 209458b的行星起了个绰号叫“地狱之火”，“地狱之火”是一个距离地球150光年位于飞马座的巨大的气体行星。与所绕恒星距离过近的巨型气态行星，它们拥有地狱般可怕的炽热有毒大气层。



距地球两千八百万光年的宽边帽星系



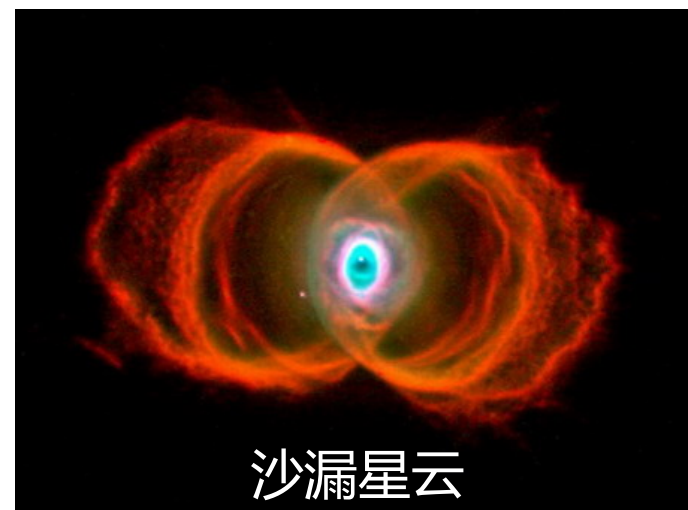
被命名为蚂蚁星云的Mz3



锥形星云

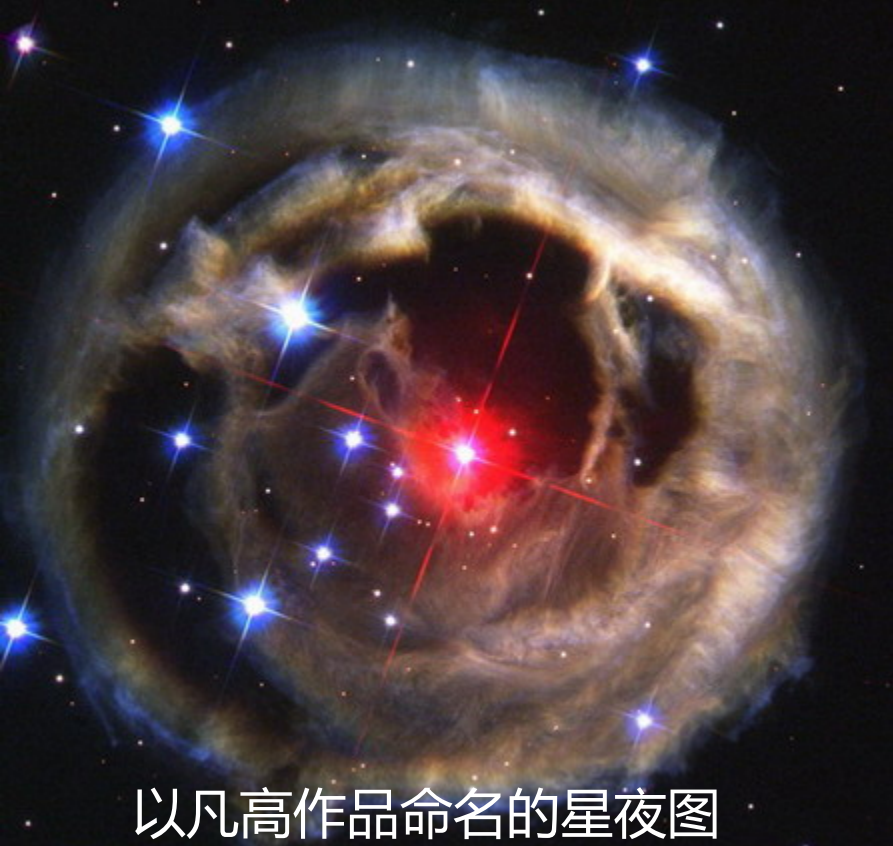


爱斯基摩星云NGC 2392

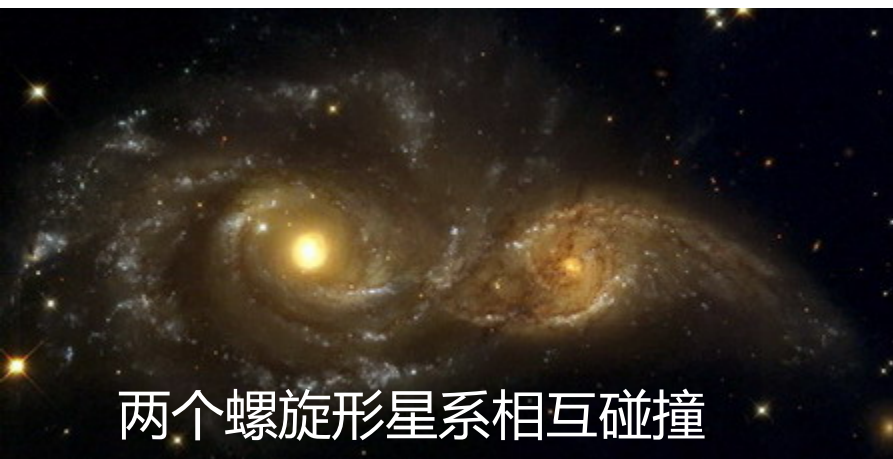


沙漏星云





以凡高作品命名的星夜图



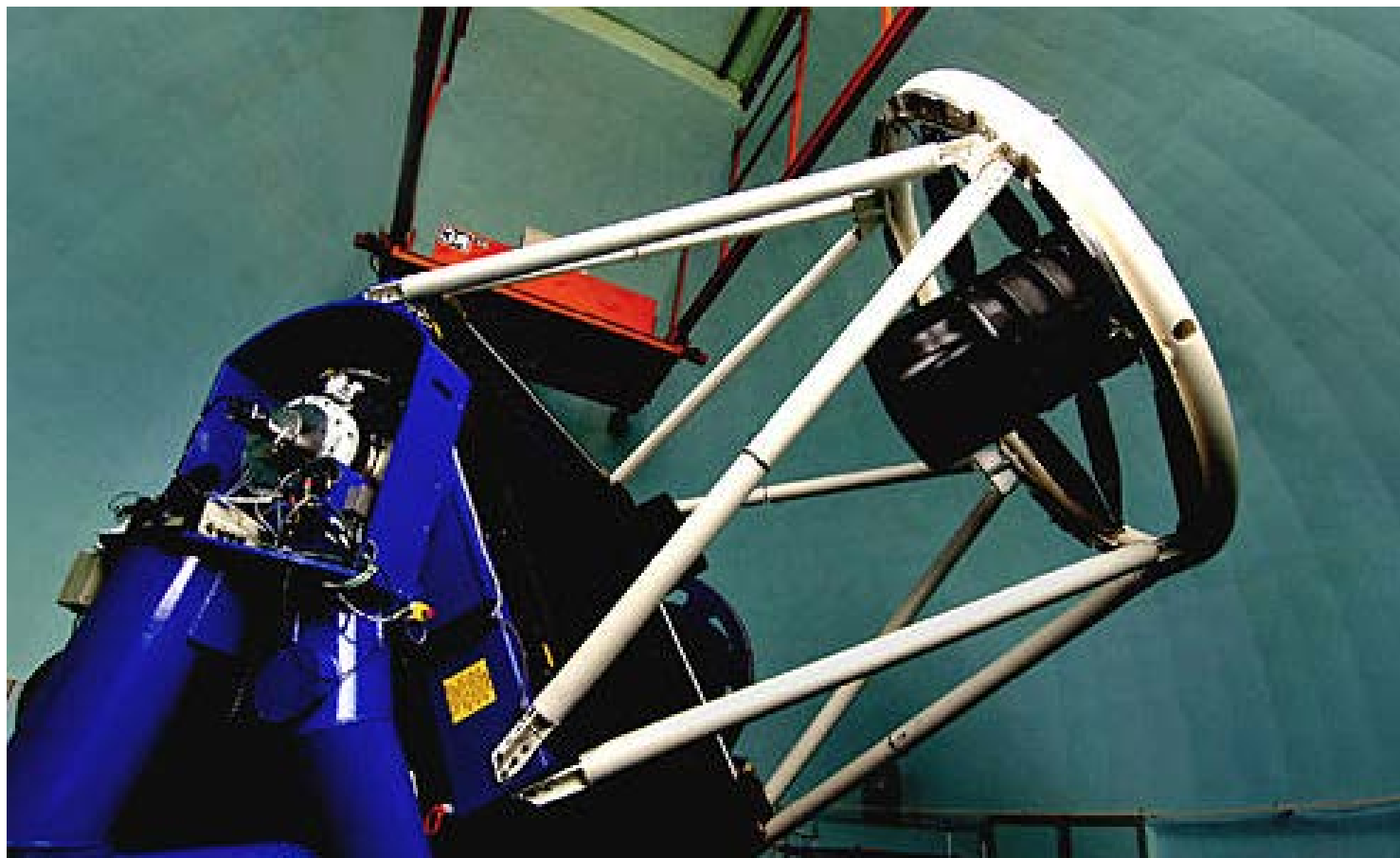
两个螺旋形星系相互碰撞

人马座的三裂星云



下一代太空望远镜

NASA表示，预计于2013年将“韦伯（James Webb Space Telescope）”望远镜发射升空。镜片直径6.5米，将替代哈勃望远镜，能观察到宇宙中最古老和最黯淡的星云团。空间位置位于第二拉格朗日点。其主要任务是调查作为大爆炸理论的残余红外线证据（宇宙微波背景辐射）



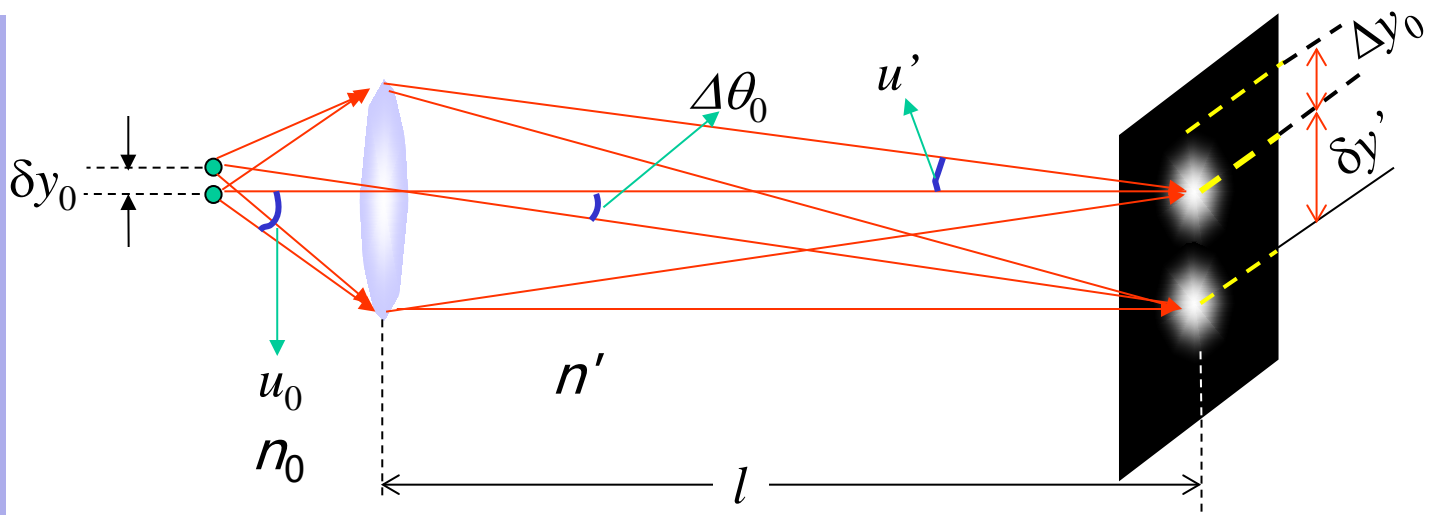
这是投入运行的大型光学天文望远镜（4月10日摄）。2007年5月12日，国内目前最大的一台光学天文望远镜在中国科学院云南天文台丽江观测站落成并正式投入运行。这台大型光学天文望远镜高8米，重40余吨，通光孔径2.4米，主要用于对恒星和星系进行观测。



国际上口径最大的大视场望远镜、国家重大科学工程——大天区面积多目标光纤光谱天文望远镜（LAMOST）项目，2001年8月正式开工建设，2008年10月建成，国家投资2.35亿。其视场为5度（相近口径的常规天文望远镜视场小于1度），口径大于6米。光学系统由反射改正镜、球面镜和焦面三个部分构成，单次观测最多可同时获得4000个天体光谱。

(3) 显微镜

显微镜的特点是物镜焦距短，被观测的小物体放在物镜焦点附近，中间像面离镜头较远。根据其性能，它的分辨率不用最小分辨角，而用最小分辨距离来衡量



艾里斑对物镜中心张开的半角宽度： $\Delta\theta_0 \approx 1.22 \frac{\lambda_0}{n' D}$ ；瑞利判据在此表现为：

$$\delta y_m' = \Delta y_0 = l \cdot \Delta\theta_0 = 1.22 \frac{\lambda_0}{n' \frac{D}{l}}; \quad \text{有几何关系: } \sin u' \approx \frac{D/2}{l} = \frac{D}{2 \cdot l} \text{ 得:}$$

$$\delta y_m' = 0.61 \frac{\lambda_0}{n' \sin u'}, \quad \text{由Abbe正弦条件, } n_0 \delta y_0 \sin u_0 = n' \delta y' \sin u' \text{ 得:}$$

$$\delta y_{0m} = 0.61 \frac{\lambda_0}{n_0 \sin u_0} = 0.61 \frac{\lambda_0}{N.A.}, \quad N.A. = n_0 \sin u_0 \text{ 称为显微镜的数值孔径。}$$

Numerical aperture

$$\delta y_{0m} = 0.61 \frac{\lambda_0}{n_0 \sin u_0} = 0.61 \frac{\lambda_0}{N.A.}$$

*几点说明：

1. 显微镜的有效放大倍数：

$$M_{eff} = \frac{\delta y_e}{\delta y_{0m}}$$

比如，显微镜的 $N.A.=1.5$ ，照明波长为 $550nm$ 的有效放大倍数：

$$M_{eff} = \frac{\delta y_e}{\delta y_{0m}} = \frac{\delta y_e}{0.61 \frac{\lambda_0}{N.A.}} = \frac{0.1mm}{0.61 \times \frac{550nm}{1.5}} \approx 450 \text{倍}$$

这是光学显微镜的最大放大倍数，因为超过 M_{eff} 的放大倍数以试图看到小于 δy_{0m} 的细节是徒劳的。

2. 提高分辨率的方法之一是提高 $N.A.$ ，可通过油浸和使用广角透镜获得较大的数值孔径。不过 $N.A.$ 最大为1.5左右，此时 $\delta y_{0m} \approx \lambda_0/2$ ，这是传统光学显微镜的极限分辨率一半波长。
3. 选择短波长光照明是提高显微镜分辨本领的另一个途径。

电子显微镜：

传统的光学显微镜的分辨本领受限于光波长，使用短波长光照明是提高显微镜分辨本领的途径之一。利用运动电子的具有波动性制造电子显微镜，因为电子的**德布罗意波长**极短，所以它有极高的空间分辨本领。

电子显微镜的分辨本领，电子束发散角较小， $u_0 \sim 0.16\text{rad}$ ；

$$\delta y_m^E \approx 0.61 \frac{\lambda_e}{N.A.} \approx 0.61 \frac{\lambda_e}{0.16} \approx 4\lambda_e$$

电子波长取决于电子的加速电压：

$$\frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = eV$$

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

加速电压	电子波长	分辨本领	有效放大率
10^4V	$1.2 \times 10^{-2}\text{nm}$	$5 \times 10^{-2}\text{nm}$	2×10^6
10^5V	$3.7 \times 10^{-3}\text{nm}$	$1.5 \times 10^{-2}\text{nm}$	6×10^6

1986年诺贝尔物理学奖一半授予德国柏林弗利兹-哈伯学院 (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft) 的**恩斯特·鲁斯卡 (Ernst Ruska, 1906-1988)**，以表彰他在电光学领域做了基础性工作，并设计了第一架**电子显微镜**；另一半授予瑞士鲁希利康 (Rüschlikon) IBM苏黎世研究实验室的德国物理学家**宾尼希 (Gerd Binnig, 1947-)**和瑞士物理学家**罗雷尔 (Heinrich Rohrer, 1933-)**以表彰他们设计出了**扫描隧道显微镜**。



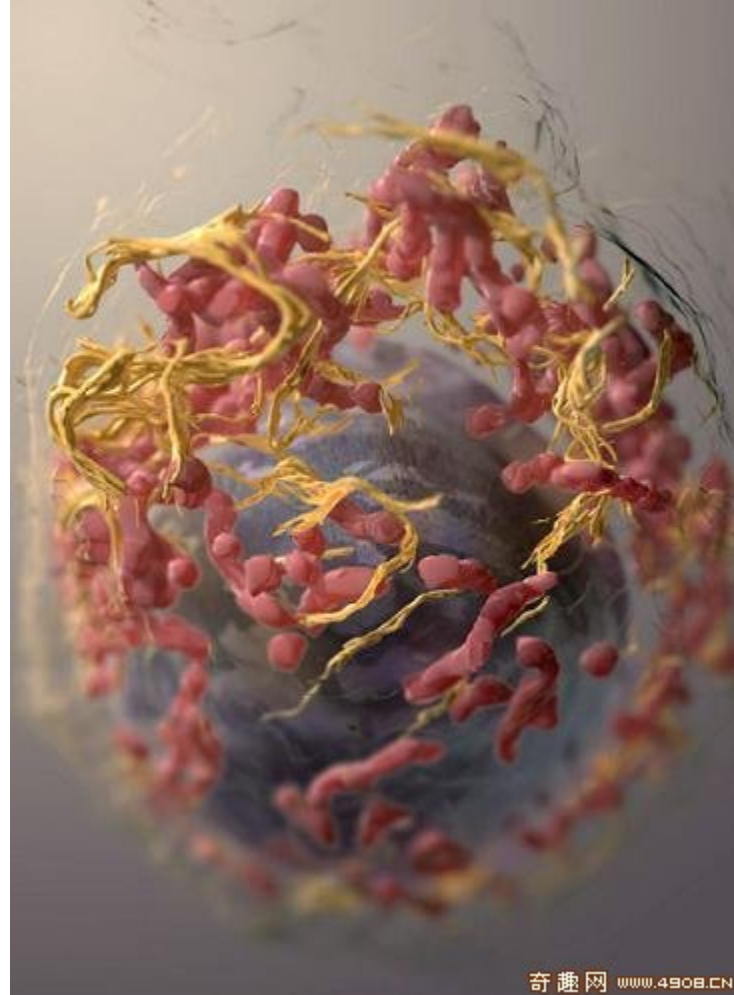
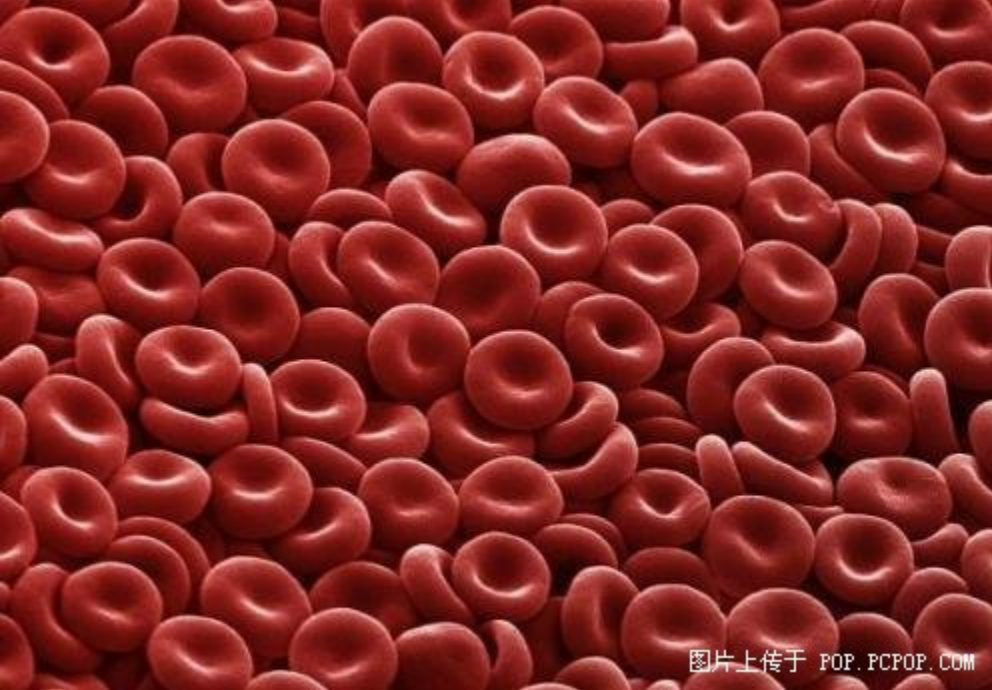
TECNAI F30场发射透射电镜

点分辨率：0.205 nm point at 300kV
线分辨率：0.102 nm line at 300kV

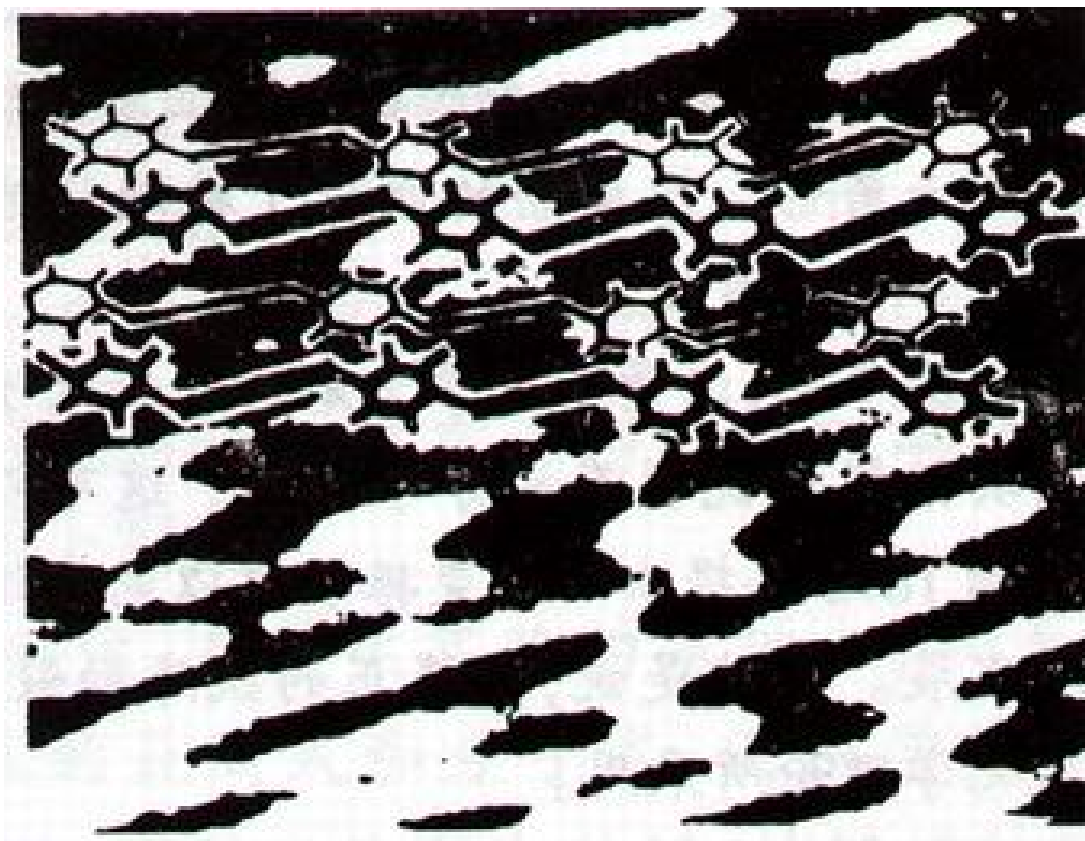


环境可控扫描电镜

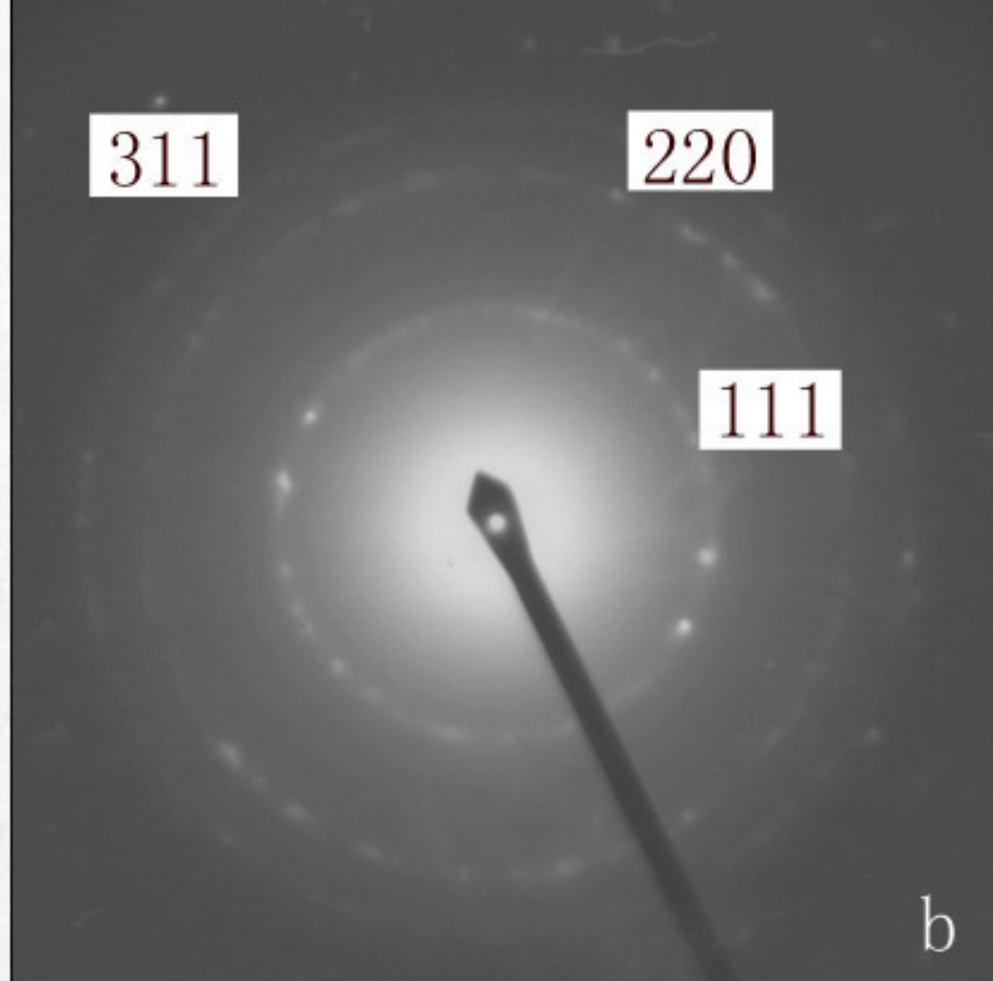
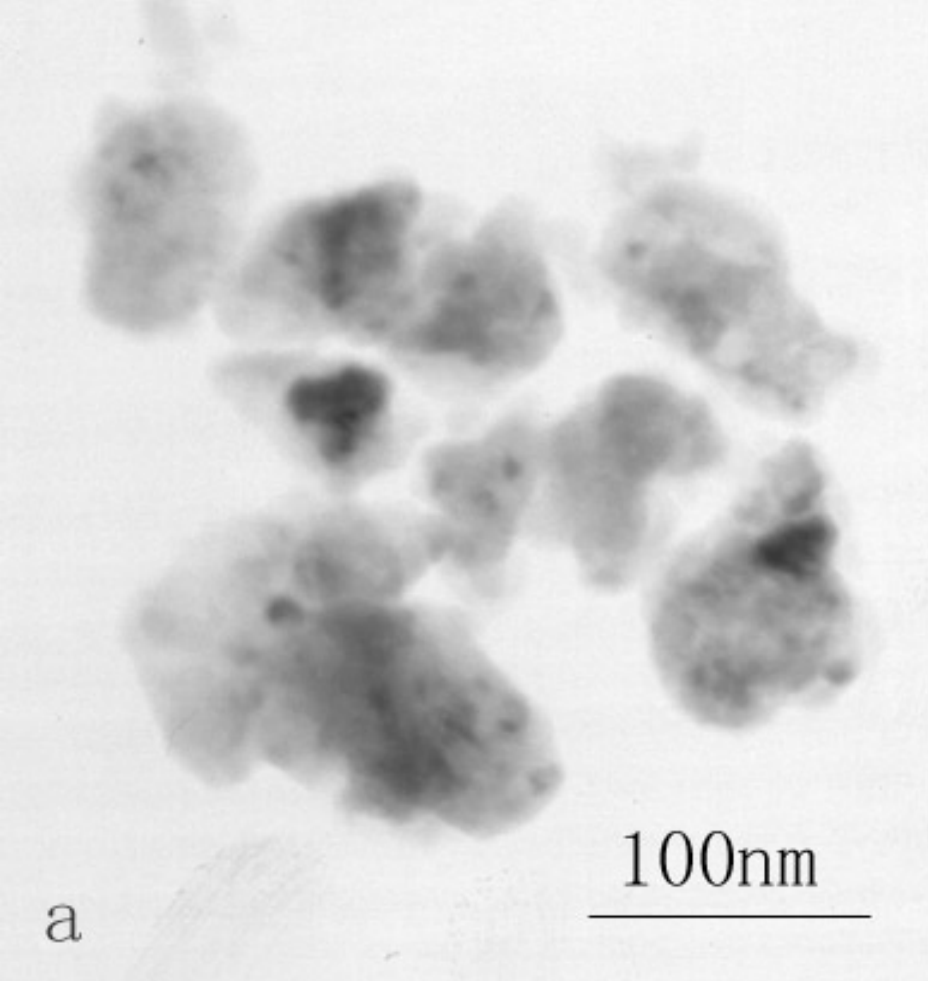
特点:图像分辨率高对任何样品无需处理，可直接进行观察；进行动态反应过程的直接观察。



电子显微镜照片



用电子显微镜拍摄的苯分子照片



GaAs纳米晶的透射电镜照片和电子衍射图, 透射电镜下观察到的主要是GaAs纳米晶的团聚体,同时,在团聚体中也可一观察到5-20 nm的GaAs颗粒,图b是图a对应的电子衍射图,可以看出,只有面心立方结构GaAs纳米晶的多晶衍射特征环.

成像系统衍射极限

- 选择记录介质的空间分辨率

例题：一照相机，选其光圈为4.0，即相对孔径 $\frac{D}{f} = \frac{1}{4}$ ，计算

像方最小分辨率？

$$\delta y'_m \approx f \cdot \Delta\theta_0 \approx 1.22 \frac{\lambda}{D} \cdot f = 1.22 \frac{\lambda}{D/f} = 1.22 \times 4\lambda$$

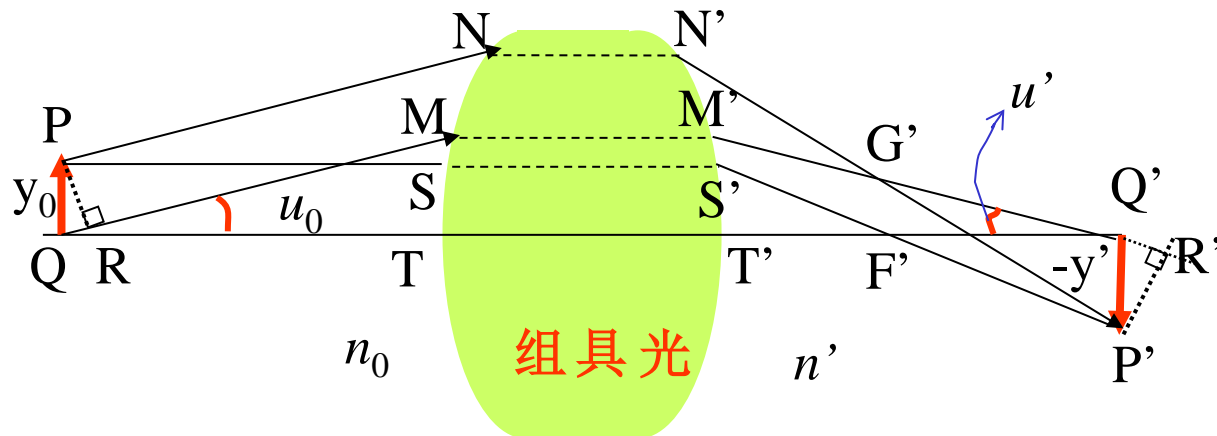
这里 $\lambda \approx 550nm$ ，所以：

$$\delta y'_m \approx 2.7 \mu m$$

与其匹配的胶卷的空间分辨率应该是：

$$N \geq \frac{1}{\delta y'_m} \approx 370 \text{线} / mm$$

附录：阿贝正弦条件



在傍轴条件下：

$$(F'P') = (F'Q'), \quad (G'P') = (G'R')$$

物像等光程

$$(PNN'P') = (PSS'P'); \quad (QMM'Q') = (QTT'Q')$$

$$(PNN'G') = (RMM'G'); \quad (PSS'F') = (QTT'F')$$

所以：

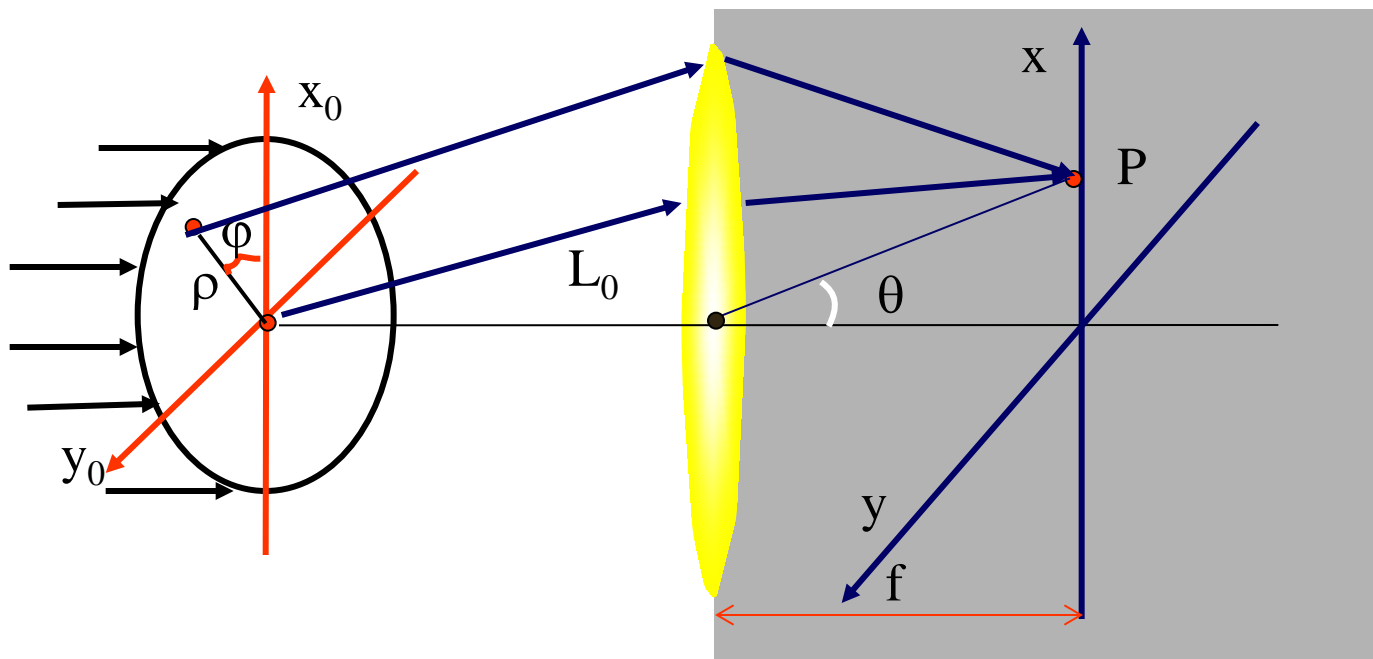
$$(QR) = (Q'R'); \quad (QR) = n_0 y_0 \sin u_0, \quad (Q'R') = n' y' \sin u'$$

得到阿贝正弦条件：

$$n_0 y_0 \sin u_0 = n' y' \sin u'$$

作业

1. 菲涅耳圆孔衍射图样的中心点可能是亮的，也可能是暗的，而夫琅禾费圆孔衍射图样的中心总是亮的，这是为什么？
2. 人眼观测很远的卡车前灯，已知两车灯的间距是1.5m，瞳孔直径为3mm，有效波长为550nm，问人眼能够分辨两车灯时，卡车和人有多远。
3. 圆孔夫琅禾费衍射，圆孔的直径为D，透镜前的介质为空气（折射率 $n_1=1$ ），透镜后的介质折射率为 n_2 ，透镜在介质2中的后焦距为 f ，入射光波长在空气中为 λ_0 ，求接受屏(x, y)上艾立斑大小？



5、位移-相移定理 (*)

在 $\Delta z=0$ 的同一平面内

全同衍射结构的夫琅禾费衍射场

在夫琅禾费衍射系统中，当一个图像位移时，夫琅禾费衍射场响应一个相移。

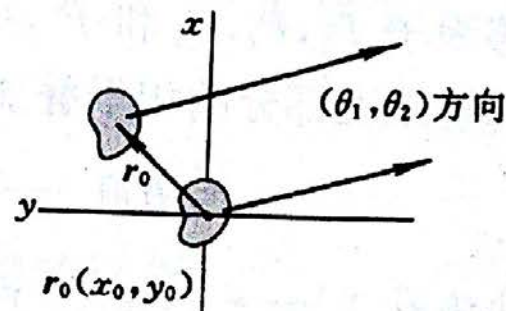
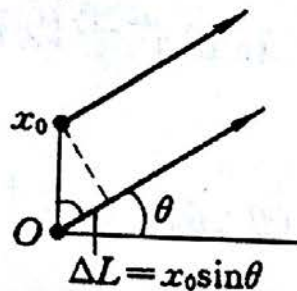
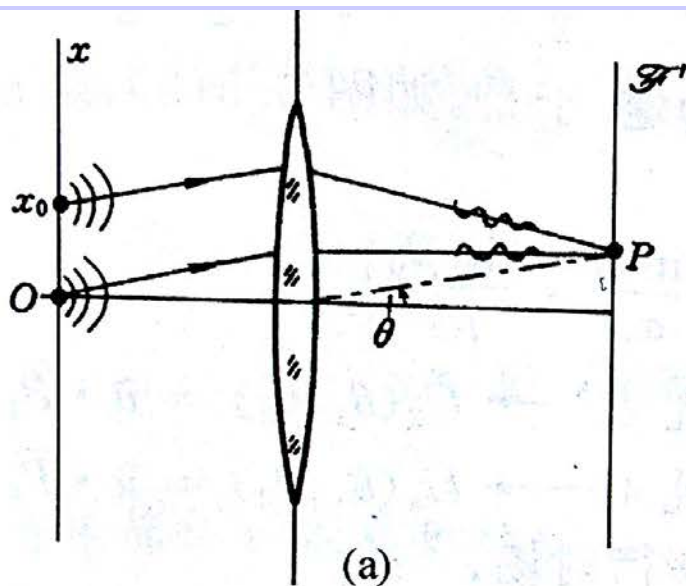
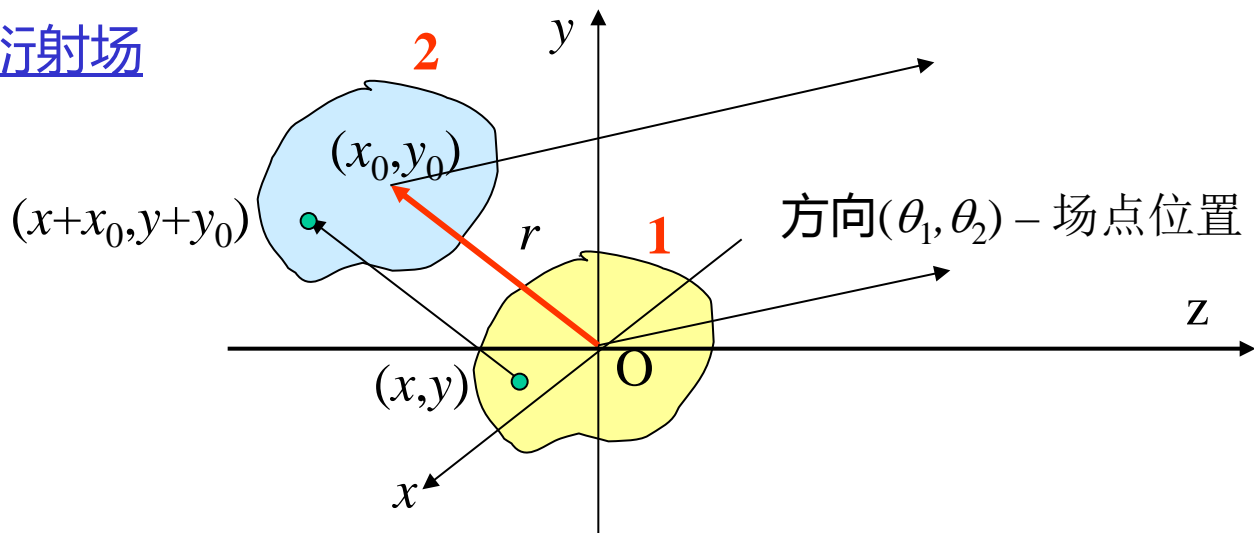


图 5.4 对位移-相移定理的说明和证明

$$\tilde{U}_0(x-x_0, y-y_0) = \tilde{U}_0(x, y), \quad \Sigma'_0 = \Sigma_0, \quad kr_2 - kr_1 = -k(x_0 \sin \theta_1 + y_0 \sin \theta_2)$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{U}_2(\theta_1, \theta_2) &= \frac{-i}{\lambda} \iint_{\Sigma_0} \tilde{U}_0(x, y) \frac{e^{ikr_1 - ik(x_0 \sin \theta_1 + y_0 \sin \theta_2)}}{f} dx dy \\
 &= e^{-ik(x_0 \sin \theta_1 + y_0 \sin \theta_2)} \cdot \frac{-i}{\lambda} \iint_{\Sigma_0} \tilde{U}_0(x, y) \frac{e^{ikr_1}}{f} dx dy \\
 &= \underline{e^{-ik(x_0 \sin \theta_1 + y_0 \sin \theta_2)} \cdot \tilde{U}_1(\theta_1, \theta_2)}
 \end{aligned}$$

位移-相移定理:

在夫琅禾费衍射系统中，当一个图像位移时，夫琅禾费衍射场对应一个相移；

图像位移 $(x_0, y_0) \Leftrightarrow$ 衍射场相移 (δ_1, δ_2)

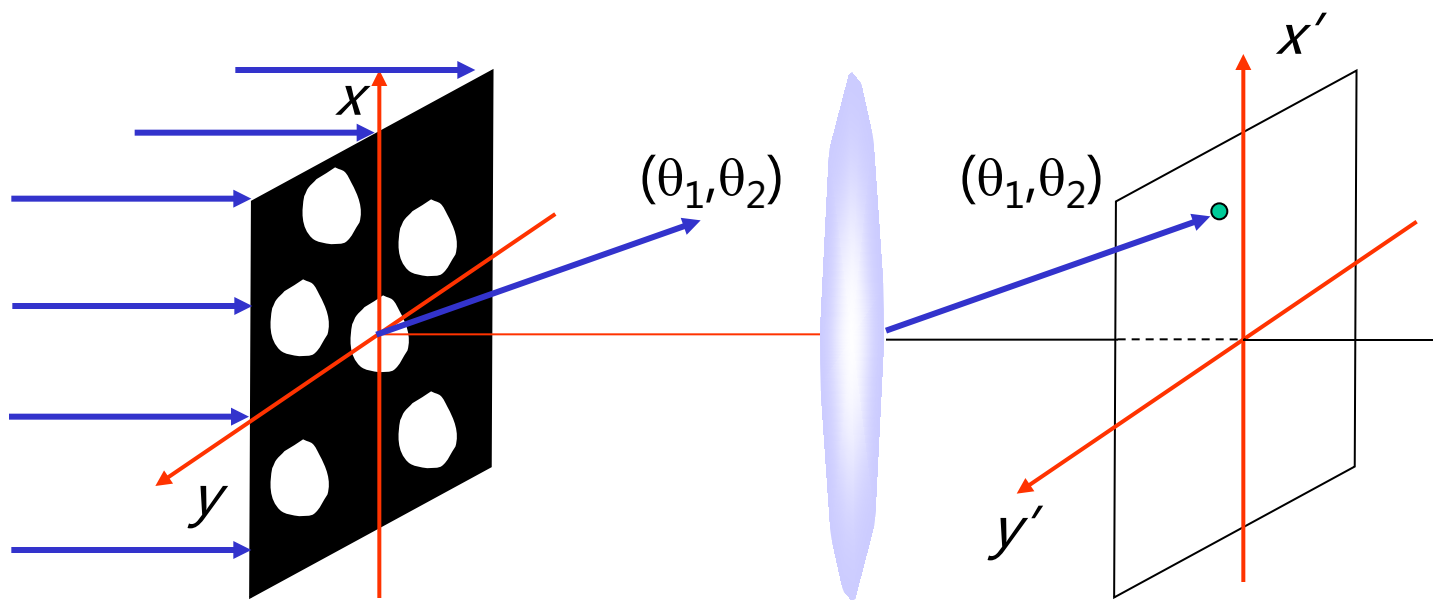
$$\tilde{U}'(\theta_1, \theta_2) = \underline{e^{i(\delta_1 + \delta_2)} \cdot \tilde{U}(\theta_1, \theta_2)}$$

这里：

$$\begin{cases} \delta_1 = -kx_0 \sin \theta_1 \\ \delta_2 = -ky_0 \sin \theta_2 \end{cases}$$

说明：对该定理的证明中，隐含了“系统具有空间不变性”。

应用：全同结构的夫琅禾费衍射场



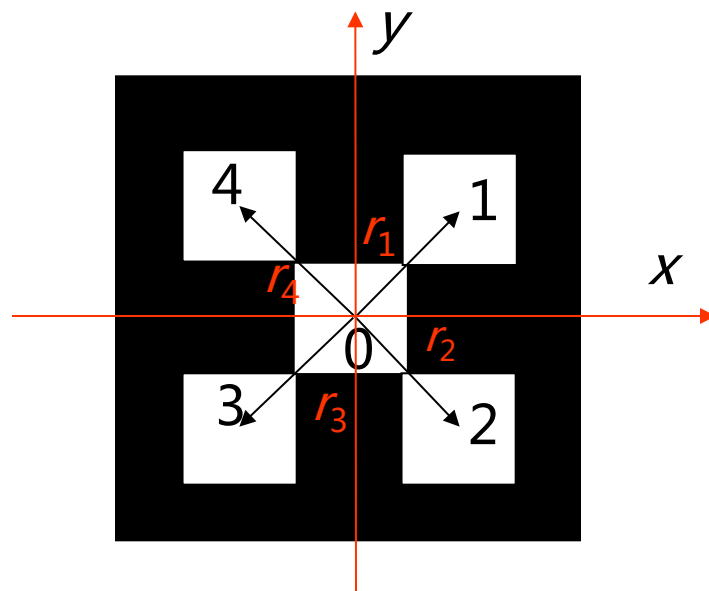
图像位移 $(x_i, y_i) \iff$ 衍射场相移 $(\delta_{i1}, \delta_{i2})$

$$\tilde{U}_i(\theta_1, \theta_2) = e^{i(\delta_{i1} + \delta_{i2})} \cdot \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2); \quad \text{其中: } \begin{cases} \delta_{i1} = -kx_i \sin \theta_1 \\ \delta_{i2} = -ky_i \sin \theta_2 \end{cases}$$

总的衍射场:

$$\tilde{U}(\theta_1, \theta_2) = \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{U}_i(\theta_1, \theta_2) = \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) \left(\sum_{i=0}^{N-1} (e^{i(\delta_{i1} + \delta_{i2})}) \right)$$

例：五方孔的夫琅禾费衍射场



方孔夫琅禾费衍射场($a = b$):

$$\tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) = \tilde{c} \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right) \left(\frac{\sin \beta}{\beta} \right), \quad \text{其中 } \alpha = \frac{\pi a \sin \theta_1}{\lambda}, \quad \beta = \frac{\pi a \sin \theta_2}{\lambda}$$

位移： $r_1, (a, a), \quad r_2, (a, -a), \quad r_3, (-a, -a), \quad r_4, (-a, a)$

位移—相移定理：

$$\tilde{U}_1(\theta_1, \theta_2) = e^{-ik(a \sin \theta_1 + a \sin \theta_2)} \cdot \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2)$$

$$\tilde{U}_2(\theta_1, \theta_2) = e^{-ik(a \sin \theta_1 - a \sin \theta_2)} \cdot \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2)$$

$$\tilde{U}_3(\theta_1, \theta_2) = e^{-ik(-a \sin \theta_1 - a \sin \theta_2)} \cdot \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2)$$

$$\tilde{U}_4(\theta_1, \theta_2) = e^{-ik(-a \sin \theta_1 + a \sin \theta_2)} \cdot \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2)$$

这五个方孔的衍射场为：

$$\tilde{U}(\theta_1, \theta_2) = \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) + \tilde{U}_1(\theta_1, \theta_2) + \tilde{U}_2(\theta_1, \theta_2) + \tilde{U}_3(\theta_1, \theta_2) + \tilde{U}_4(\theta_1, \theta_2)$$

$$= \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) (1 + e^{-ik(a \sin \theta_1 + a \sin \theta_2)} + e^{-ik(a \sin \theta_1 - a \sin \theta_2)} + e^{-ik(-a \sin \theta_1 - a \sin \theta_2)} + e^{-ik(-a \sin \theta_1 + a \sin \theta_2)})$$

$$= \tilde{c} \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right) \left(\frac{\sin \beta}{\beta} \right) (1 + 2 \cos(a \sin \theta_1 + a \sin \theta_2) + 2 \cos(a \sin \theta_1 - a \sin \theta_2))$$

$$I(\theta_1, \theta_2) = \tilde{U}(\theta_1, \theta_2) \cdot \tilde{U}^*(\theta_1, \theta_2)$$

注解： $\tilde{c} = \frac{-i}{\lambda f} A a b e^{ikL_0} \propto \Sigma$

6、一维光栅、二维光栅 (*)

光栅：1、众多全同单元；2、排列规整；3、取向有序的周期结构

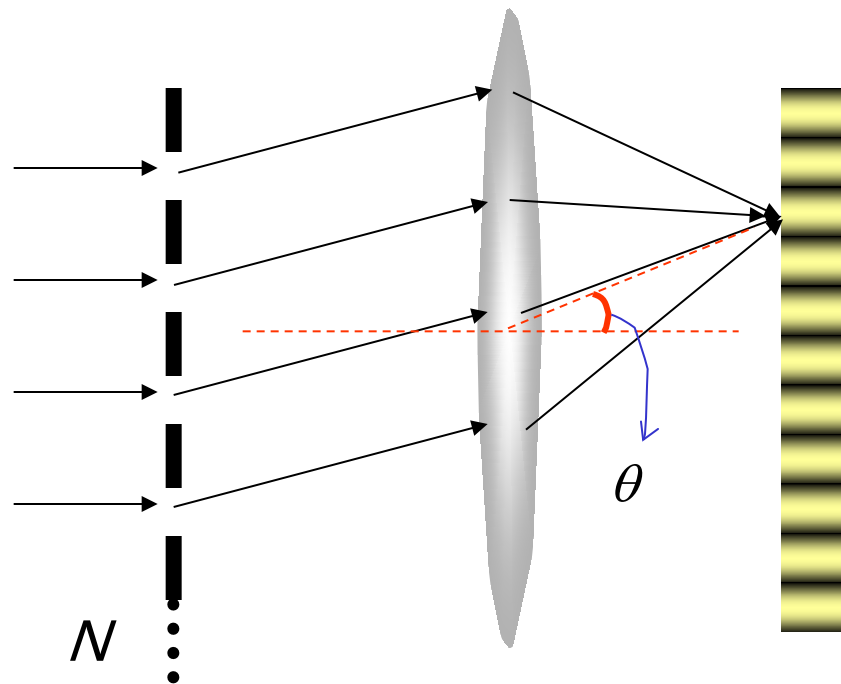
一维光栅：最简单的光栅。

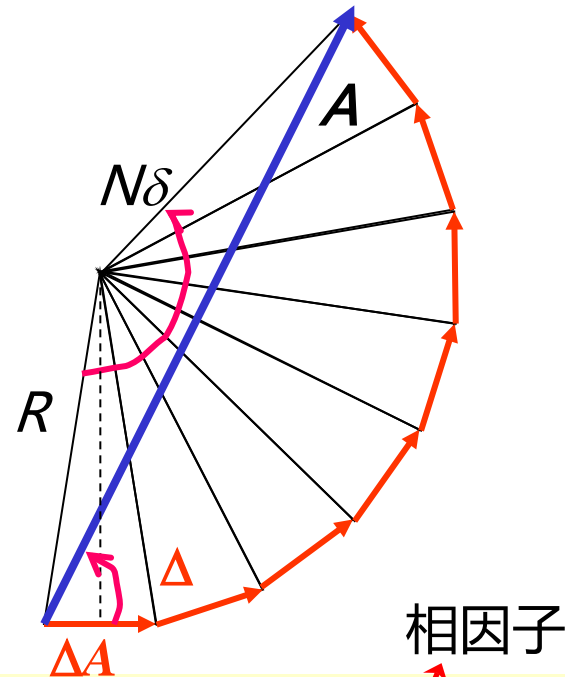
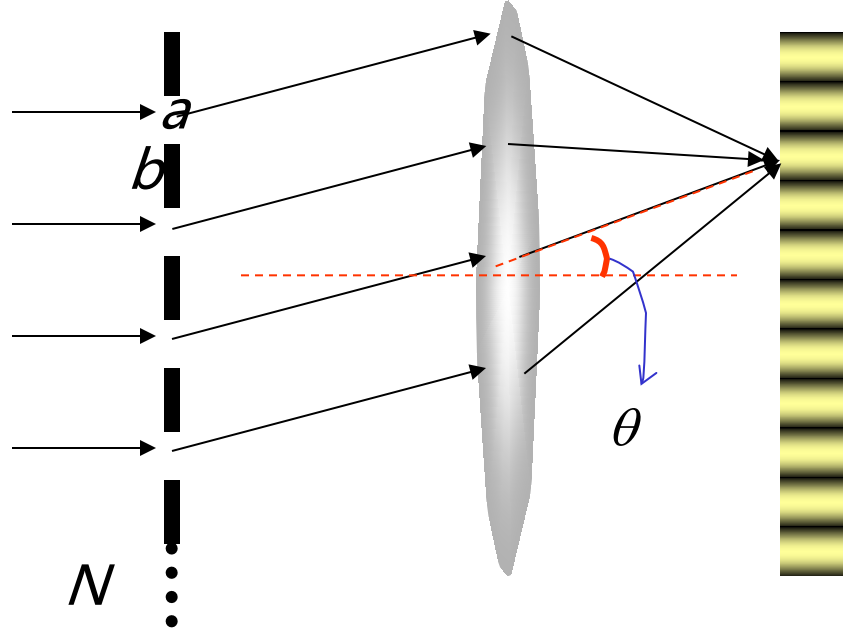
下图就是一个一维光栅，其透光缝宽为 a ，挡光宽度为 b ，即光栅的**空间周期**
 $d=a+b$ ，也称为**光栅常数**

描述光栅的参数：**单元密度**： $n = \frac{1}{d}$ ，比如 $600/mm$ 、 $1200/mm$ 等；

光栅的有效宽度： D ，比如 $5cm$ 、 $10cm$ 等

光栅的**单元总数**： $N = nD = D/d$





□ □ □ □ : 位移 $x_m = -md \Leftrightarrow$ 相移 $\delta_m = \frac{2\pi}{\lambda} md \sin \theta = m\delta$

光栅衍射场: $\tilde{U}(\theta) = \tilde{U}_0(\theta) \left(\sum_{m=0}^{N-1} (e^{i\delta_m}) \right) = \tilde{U}_0(\theta) \frac{1 - e^{iN\delta}}{1 - e^{i\delta}} = \tilde{U}_0(\theta) \underbrace{e^{i(N-1)\beta}}_{\text{相因子}} \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)$

其中 $\beta = \frac{\delta}{2} = \frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta$, 这里利用了公式 $(1 - e^{i\Phi}) = -2i \cdot \sin \frac{\Phi}{2} \cdot e^{\frac{i\Phi}{2}}$

矢量图解法:

$$\Delta A = 2R \sin \frac{\delta}{2} \Rightarrow R = \frac{\Delta A}{2 \sin \frac{\delta}{2}} \Rightarrow A = 2R \sin \frac{N\delta}{2} = \Delta A \cdot \frac{\sin \frac{N\delta}{2}}{\sin \frac{\delta}{2}}$$

$$\text{光栅衍射场: } A(\theta) = \Delta A(\theta) \left(\frac{\sin \frac{N\delta}{2}}{\sin \frac{\delta}{2}} \right) = \Delta A(\theta) \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)$$

矢量图解和等比求和得到的结果完全一样。

$$\text{单缝夫琅禾费衍射场: } \tilde{U}_0(\theta) = \tilde{c} \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right), \text{ 其中 } \alpha = \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}$$

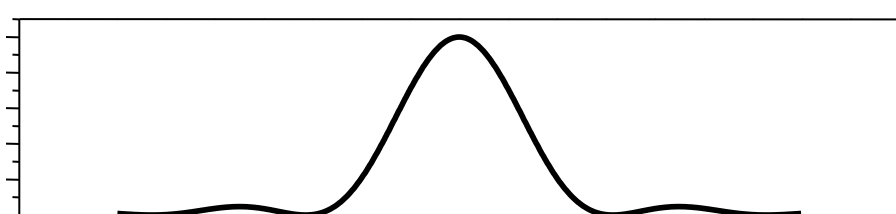
$$\text{所以: } \tilde{U}(\theta) = \tilde{c} e^{i(N-1)\beta} \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right) \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)$$

$$I(\theta) = \tilde{U}(\theta) \tilde{U}^*(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$

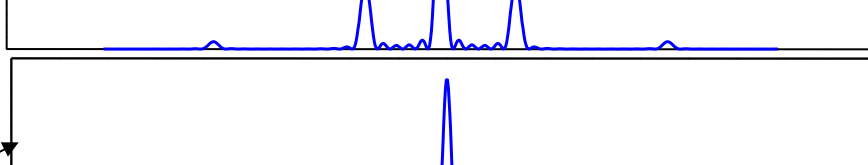
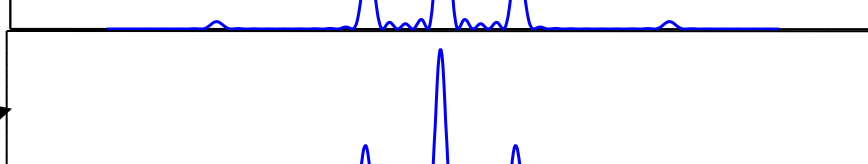
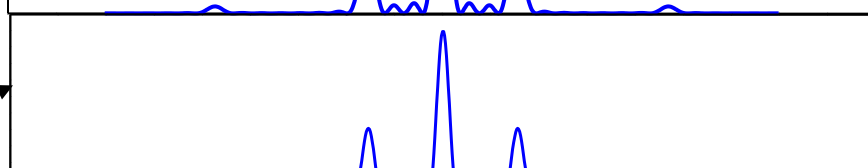
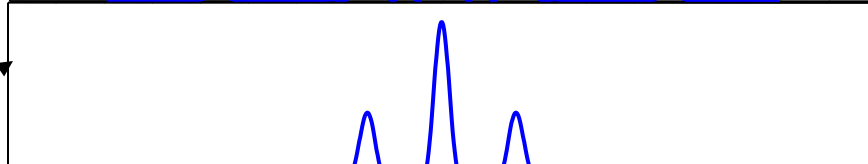
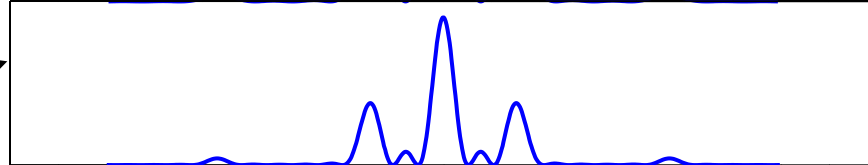
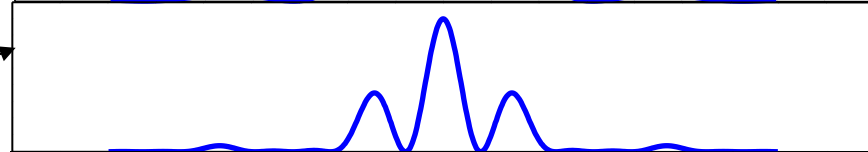
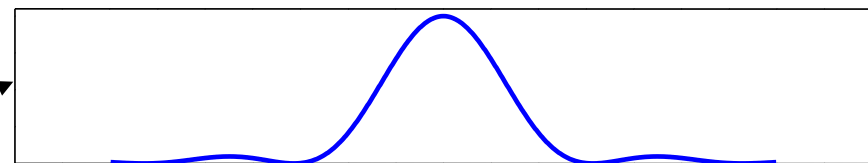
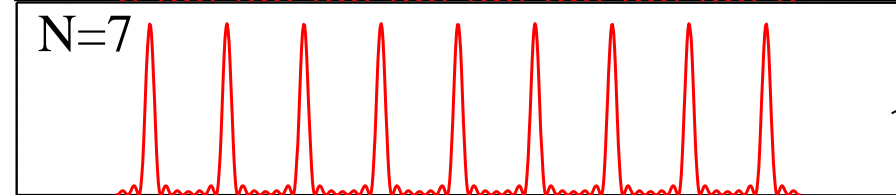
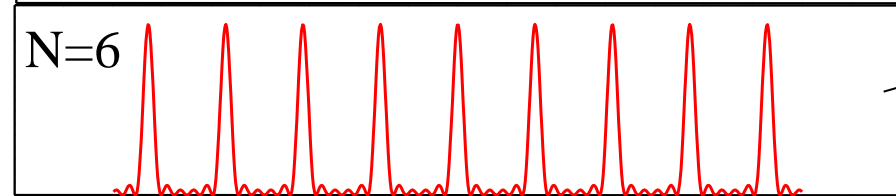
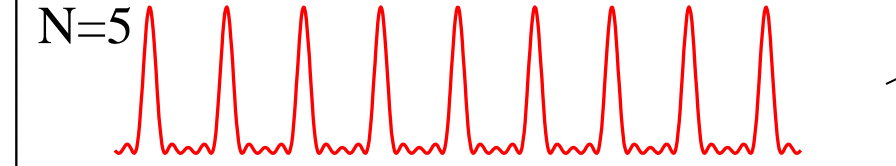
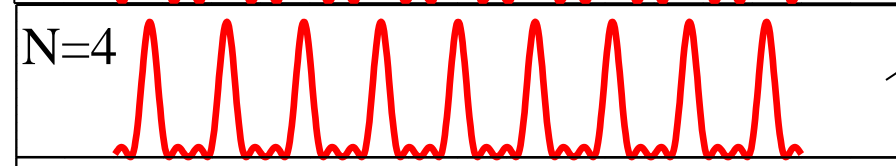
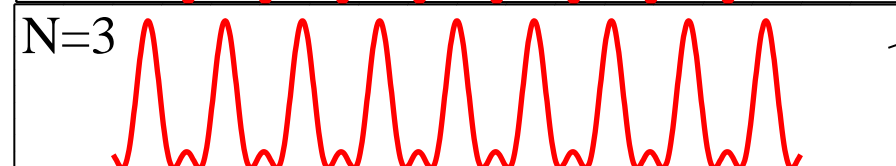
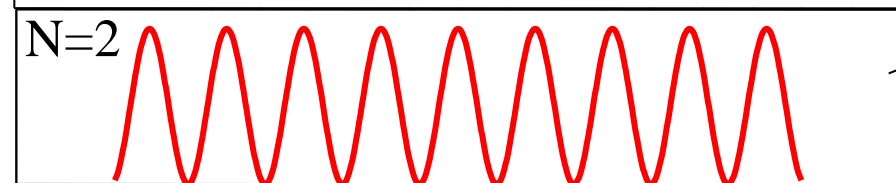
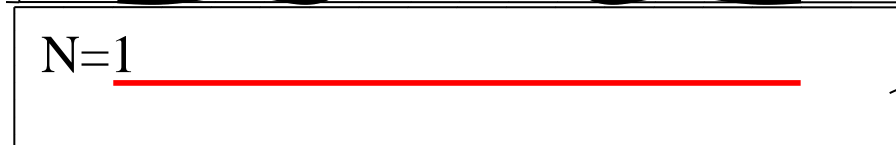
强度单元因子

强度结构因子

Next : 一维光栅强度的主要特点



$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$



(1) 主峰位置

$\beta = \frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta = k\pi$ 的地方出现主极强，即：

$d \sin \theta_k = k\lambda, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ 此式称为光栅公式。

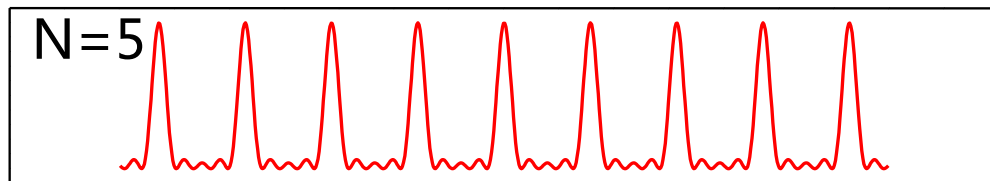
此时结构因子的极限值：

$$\left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2 = N^2 \quad I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$

于是： $I(\theta_k) = N^2 \cdot I_0(\theta_k)$

$$\alpha = \frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta$$

$$\beta = \frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta$$



(2) 半角宽度

第 k 级主峰，其左右的第一个零点，即暗点的位置 $(\theta_k, \pm \Delta\theta)$ ，应该满足：

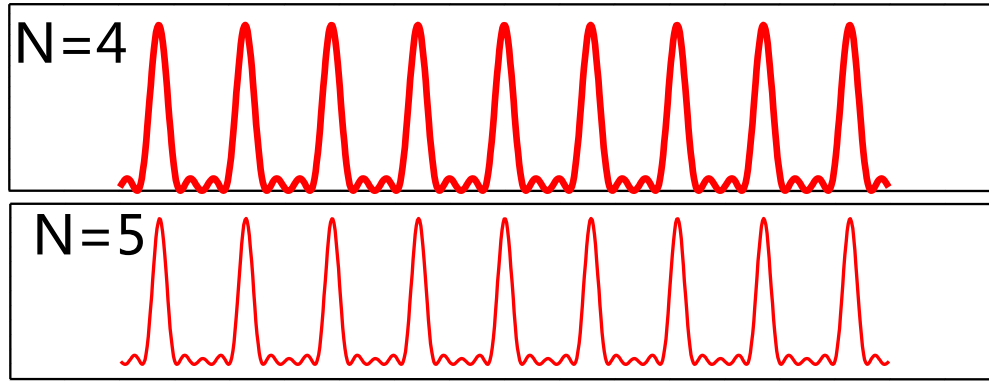
$$d \sin(\theta_k \pm \Delta\theta_k) = \left(k \pm \frac{1}{N} \right) \lambda \Rightarrow d \cos \theta_k \cdot \Delta\theta_k = \frac{\lambda}{N}$$

从而得到 k 级主峰的半角宽度：

$$\Delta\theta_k = \frac{\lambda}{Nd \cos \theta_k} = \frac{\lambda}{D \cos \theta_k}$$

光栅尺度越大，主峰半角宽度越小，两者呈反比关系。

(3) 零点与次极大



两个主峰之间有 $N-1$ 个零点和 $N-2$ 个次极大值，随 N 的增加，次极强的强度相对于主峰迅速下降，一般光栅 N 比较大，所以次极强非常弱，于是光栅的衍射图样仅仅观察到离散的非常细锐的条纹。

(4) 单元因子的作用：

单元因子 $(\sin \alpha / \alpha)^2$ 决定了入射光功率在各主峰之间的分配。在某些特殊情况下，可能使个别主极峰消失—缺级。

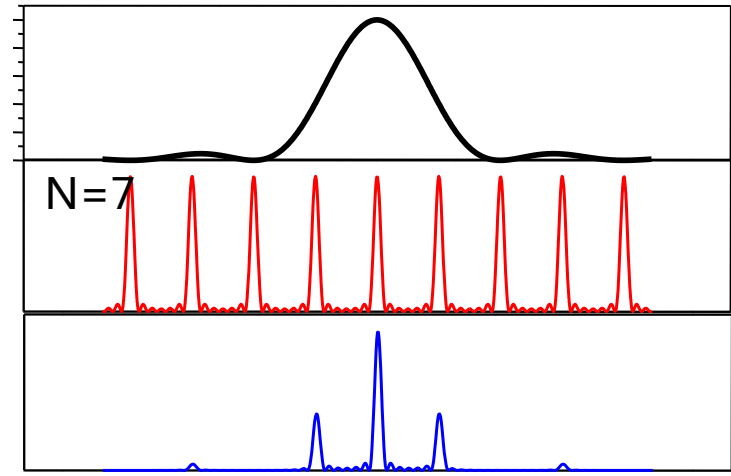
结构因子主极峰位置： $d \sin \theta_k = k\lambda$, $k = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$

单元因子暗点位置： $a \sin \theta_{k'} = k'\lambda$, $k' = \pm 1, \pm 2 \dots$

当 $\theta_{k'} = \theta_k$ 时， k 级主极峰消失，此时： $\frac{d}{a} = \frac{k}{k'}$

比如 $\frac{d}{a} = 2$, $\frac{k}{k'} = \frac{2}{1} = \frac{4}{2} = \frac{6}{3} \dots$

比如 $\frac{d}{a} = 1.5$, $\frac{k}{k'} = \frac{3}{2} = \frac{6}{4} = \frac{9}{6} \dots$



例一块一维光栅，刻缝密度为600线/mm，有效尺度为5cm，入射光为氦氖激光，波长为633nm，求第1和2级主峰的方位角以及它们的半角宽度？

根据光栅公式： $d \sin \theta_k = k\lambda$

$$d \sin \theta_1 = \lambda, \quad d \sin \theta_2 = 2\lambda$$

$$\text{即：} \sin \theta_1 = \frac{\lambda}{d} = 633nm \times 600 / mm \approx 0.38, \quad \theta_1 \approx 22^\circ 20'$$

$$\sin \theta_2 = \frac{2\lambda}{d} \approx 0.76, \quad \theta_2 \approx 49^\circ 28'$$

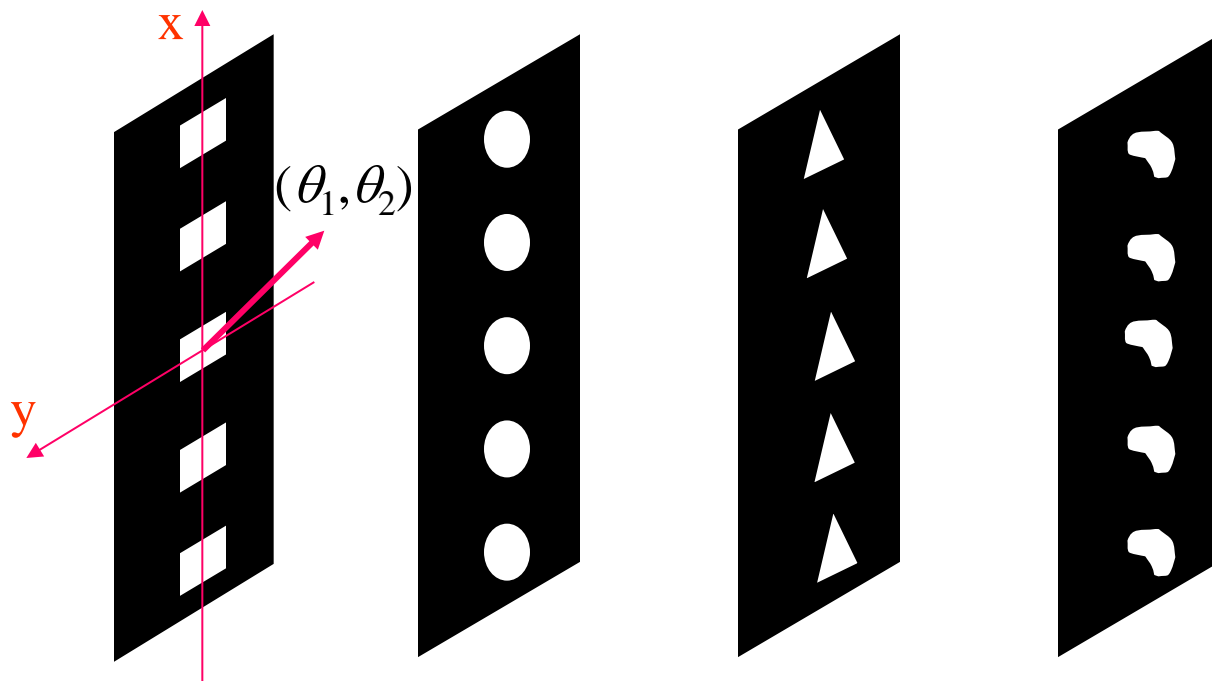
根据半角宽度公式： $\Delta \theta_k = \frac{\lambda}{D \cos \theta_k}$

$$\Delta \theta_1 = \frac{\lambda}{D \cos \theta_1}, \quad \Delta \theta_2 = \frac{\lambda}{D \cos \theta_2}$$

$$\text{即：} \Delta \theta_1 = \frac{633nm}{5cm \times \cos(22^\circ 20')} \approx 1.37 \times 10^{-5} rad;$$

$$\Delta \theta_2 = \frac{633nm}{5cm \times \cos(49^\circ 28')} \approx 1.95 \times 10^{-5} rad$$

一维周期结构的其他样式

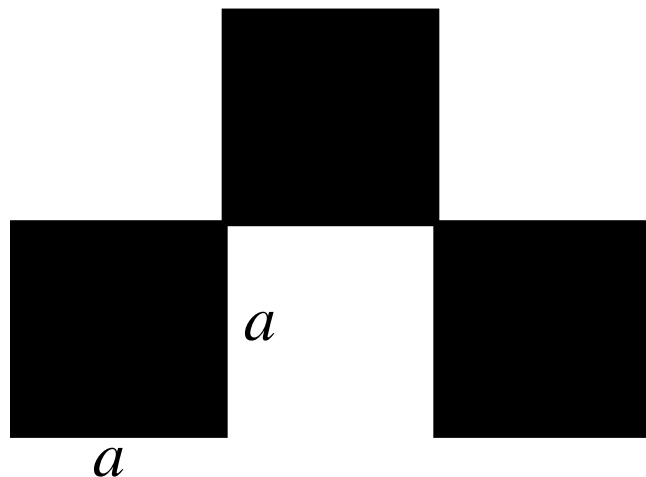


$$\tilde{U}(\theta_1, \theta_2) = \tilde{u}_0(\theta_1, \theta_2) \left[e^{i(N-1)\beta} \cdot \frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right], \quad \text{其中 } \beta = \frac{\pi d \sin \theta_1}{\lambda}$$

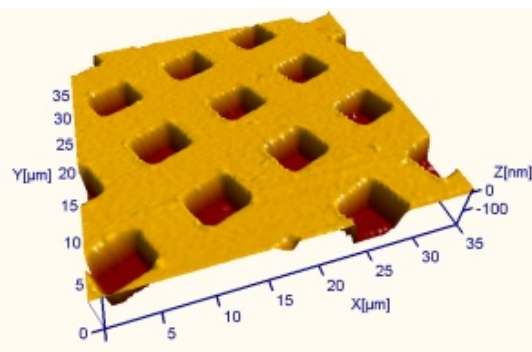
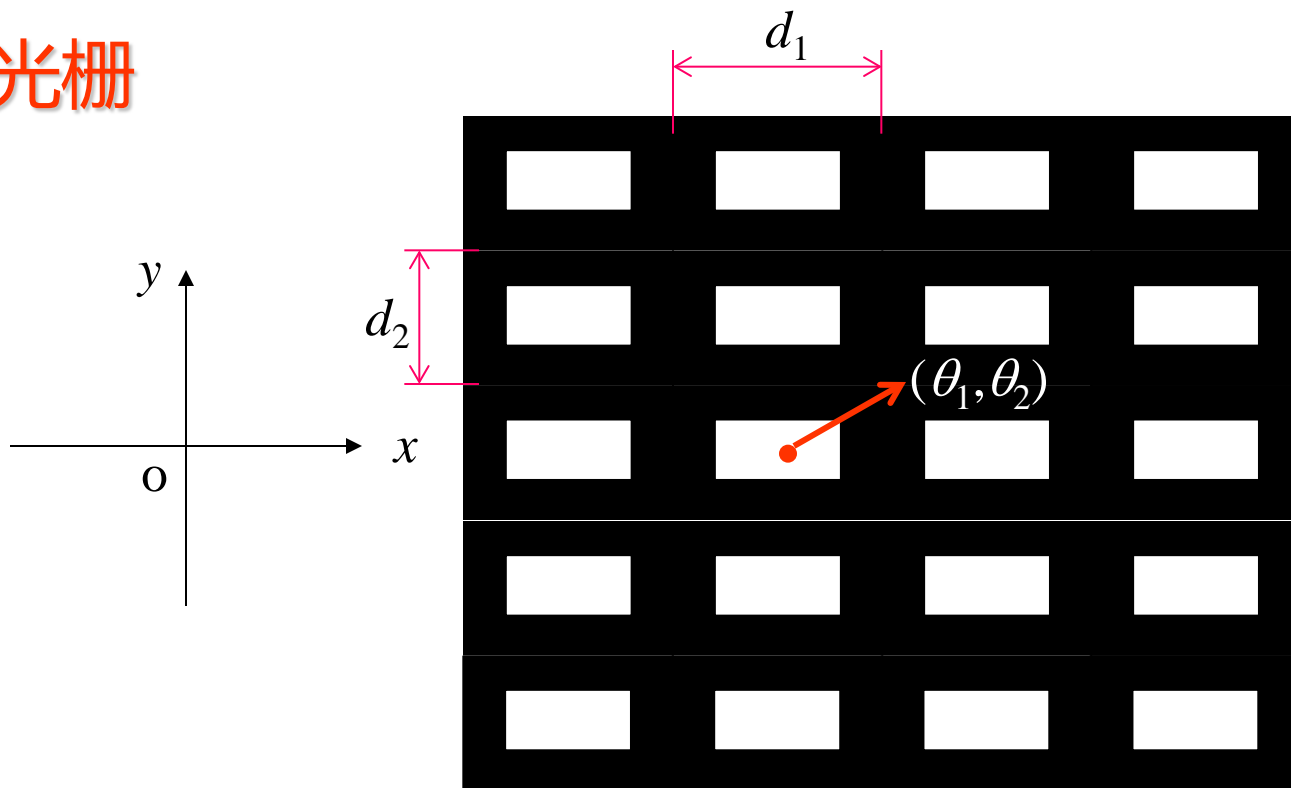
$$I(\theta_1, \theta_2) = |\tilde{u}_0(\theta_1, \theta_2)|^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$

作业

1. 一块每厘米有6000条刻线的光栅，以白光垂直入射，白光的波长范围是400–700nm，分别集散第一级和第二级光谱的角宽度，两者是否重叠？
2. 在氢和氘混合气体的发射光谱中，波长656nm的红色谱线是双线，双线的波长差为0.18nm。为了能在光栅的第二级光谱中分辨它们，光栅的刻线数至少需要多少？
3. 求“品”的夫琅禾费衍射场，黑色表示不透光。三个为全同正方形，边长为 a ，入射光正入射平面波，其振幅为 A ，波长为 λ 。



二维光栅



位移 \Leftrightarrow 相移

$$\text{位移 } x_m = -md_1 \Leftrightarrow \text{相移 } \delta_{xm} = \frac{2\pi}{\lambda} md_1 \sin \theta_1 = m\delta_x$$

$$\text{位移 } y_n = -nd_2 \Leftrightarrow \text{相移 } \delta_{yn} = \frac{2\pi}{\lambda} nd_2 \sin \theta_2 = n\delta_y$$

光栅衍射场:

$$\begin{aligned}
 \tilde{U}(\theta_1, \theta_2) &= \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) \left(\sum_{n=0}^{N_2-1} \sum_{m=0}^{N_1-1} (e^{i(m\delta_x + n\delta_y)}) \right) = \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) \sum_{n=0}^{N_2-1} e^{in\delta_y} \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{im\delta_x} \\
 &= \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) \frac{1 - e^{iN_1\delta_x}}{1 - e^{i\delta_x}} \frac{1 - e^{iN_2\delta_y}}{1 - e^{i\delta_y}} \\
 &= \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) e^{i(N_1-1)\beta_1} e^{i(N_2-1)\beta_2} \left(\frac{\sin N_1\beta_1}{\sin \beta_1} \right) \left(\frac{\sin N_2\beta_2}{\sin \beta_2} \right)
 \end{aligned}$$

其中 $\beta_1 = \frac{\delta_x}{2} = \frac{\pi}{\lambda} d_1 \sin \theta_1$, $\beta_2 = \frac{\delta_y}{2} = \frac{\pi}{\lambda} d_2 \sin \theta_2$

$$I(\theta_1, \theta_2) = \left| \tilde{U}_0(\theta_1, \theta_2) \right|^2 \left(\frac{\sin N_1\beta_1}{\sin \beta_1} \right)^2 \left(\frac{\sin N_2\beta_2}{\sin \beta_2} \right)^2$$

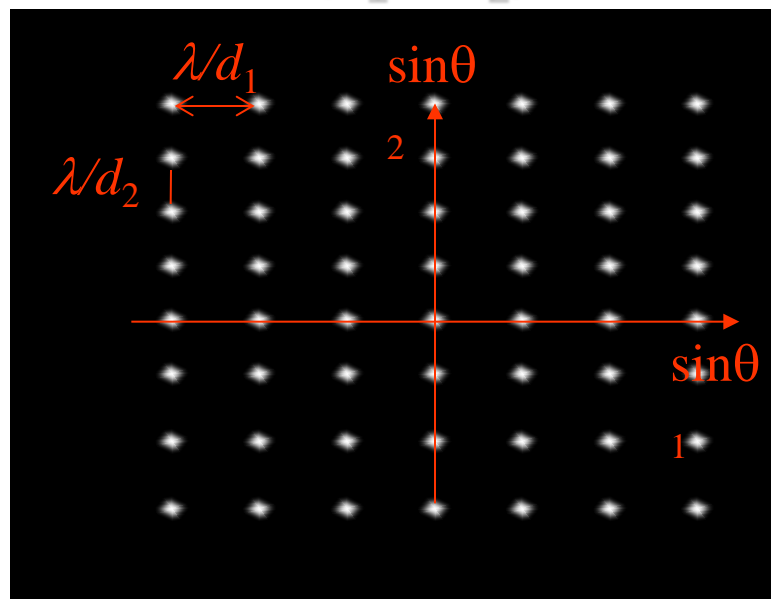
衍射结构因子，
它决定了衍射主
级强的方位角(θ_1 ,
 θ_2)。

单元衍射因子，如果为矩形则： $\left| \tilde{U}(\theta_1, \theta_2) \right|^2 = I_0 \left(\frac{\sin \alpha_1}{\alpha_1} \right)^2 \left(\frac{\sin \alpha_2}{\alpha_2} \right)^2$

$$\alpha_1 = \frac{\pi a (\sin \theta_1)}{\lambda}, \quad \alpha_2 = \frac{\pi b (\sin \theta_2)}{\lambda}$$

衍射结构因子，它决定了衍射主级强的方位角(θ_1, θ_2)。

$$\begin{cases} d_1 \sin \theta_1 = k_1 \lambda; & k_1 = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \\ d_2 \sin \theta_2 = k_2 \lambda; & k_2 = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \end{cases}$$



图为二维晶面的夫琅禾费衍射强度结构因子

相应的主峰半角宽度:

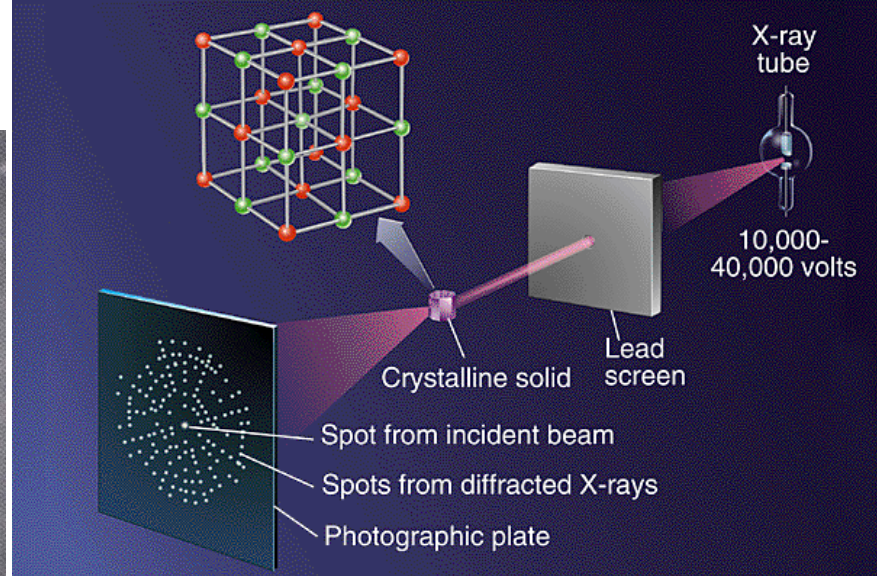
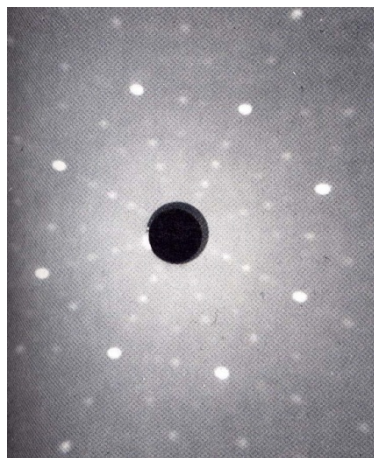
$$d_1 \sin(\theta_{1k} \pm \Delta\theta_{1k}) = \left(k \pm \frac{1}{N_1}\right) \lambda \Rightarrow d_1 \cos \theta_{1k} \cdot \Delta\theta_{1k} = \frac{\lambda}{N_1}$$

从而得到 θ_1 的 k 级主峰的半角宽度:

$$\Delta\theta_{1k} = \frac{\lambda}{N_1 d_1 \cos \theta_{1k}} = \frac{\lambda}{D_1 \cos \theta_{1k}}$$

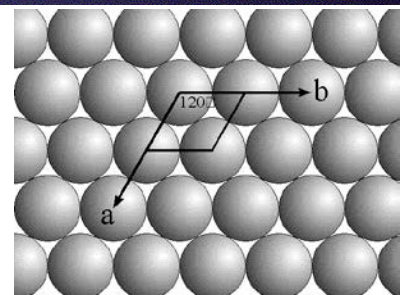
$$\text{同理: } \Delta\theta_{2k} = \frac{\lambda}{N_2 d_2 \cos \theta_{2k}} = \frac{\lambda}{D_2 \cos \theta_{2k}}$$

7、三维光栅—x射线晶体衍射



劳厄 Max von Laue (1879-1960)

德国慕尼黑大学理论物理学家, 1914年诺贝尔物理学奖--发现晶体的X射线衍射



X射线衍射现象的发现对近代物理学的发展有重要意义，因为它不仅证明了X射线是一种比可见光波长短千倍的电磁波，使人们对X射线的认识迈出了关键的一步，而且还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。这一发现继佩兰（Perrin）的布朗运动实验之后，又一次向科学界提供证据，证明原子的真实性。由于X射线衍射的发现，X射线学在理论和实验方法上飞速发展，很快形成了一门内容极为丰富、应用极为广泛、影响极为深远的综合学科。



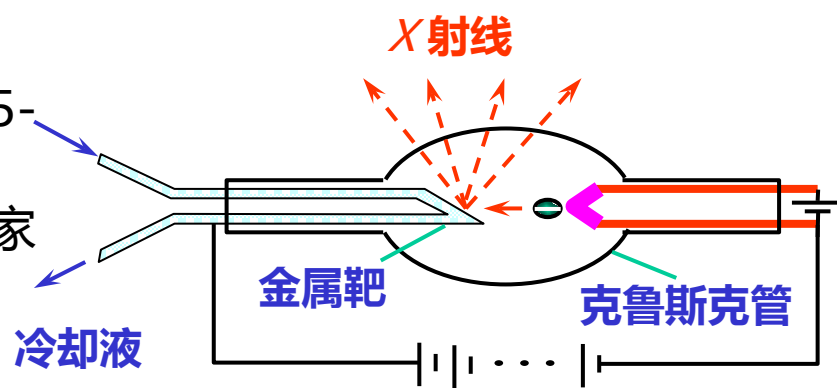
伦琴 (Rontgen, WK, 1845-1923)

德国维尔茨堡大学实验物理学家

X射线的发现者

1901年诺贝尔物理学奖

-因发现X-射线



1. X射线产生

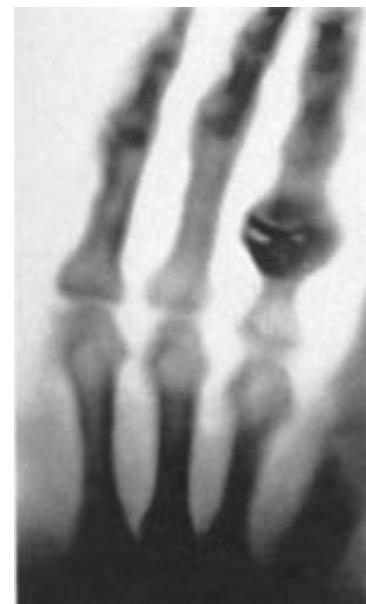
• 高能电子轰击靶材，电子进入材料表面后受原子核电场的作用而速度骤减，电子的动能转换成辐射能----轫制辐射，光谱连续。

• 高能电子将原子内层的电子激发，电子回到基态时，辐射出 X 射线，光谱不连续。

2. X射线性质：

1. X射线是一种电磁波。

2. 波长很短($10^{-11} \sim 10^{-8} \text{m}$)，X射线穿透力很强。



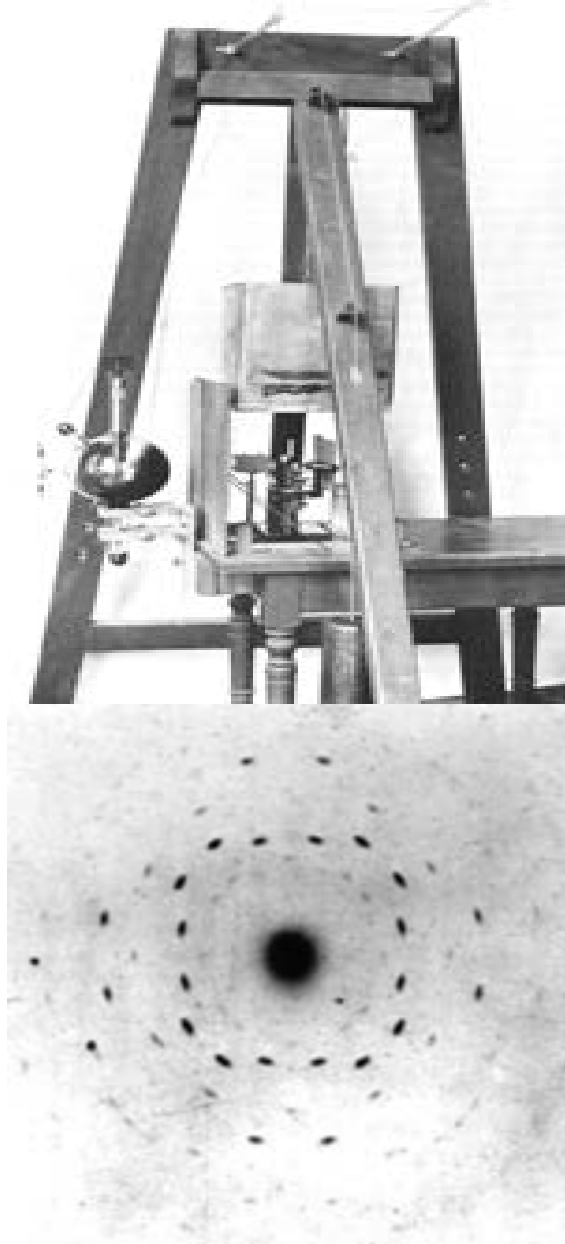
X射线的应用不仅开创了研究晶体结构的新领域，而且用它可以用作材料分析，在工程技术上有着广泛的应用，在医学和分子生物学领域也有重要价值。

X-射线衍射的发现过程：

在慕尼黑大学当时师生们讨论最多的一个问题就是X射线的本性。劳厄认为X射线是电磁波。1912年,劳厄在同一位博士研究生厄瓦耳交谈时,产生了用X射线照射晶体用以研究固体结构的想法。

他设想X射线是极短的电磁波,而晶体又是原子(离子)的有规则的三维排列,就像是一块天然光栅那样,只要X射线的波长和晶体中原子(离子)的间距具有相同的数量级,而且晶体中原子的排列是有规则的,那么当用X射线照射晶体时就应能观察到干涉现象。

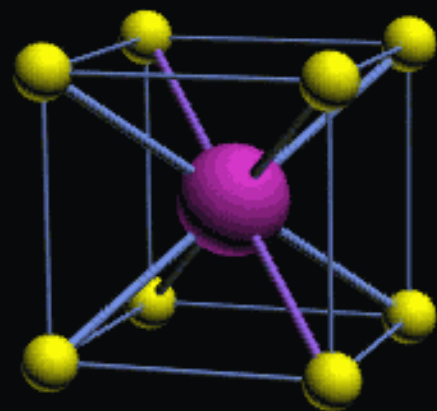
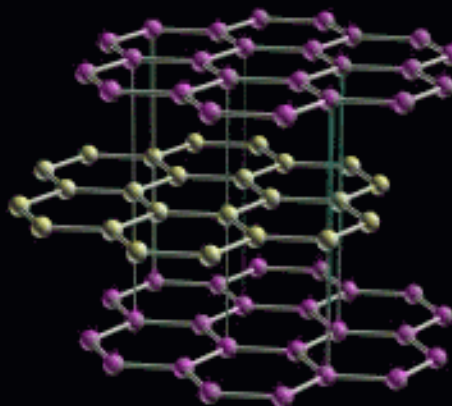
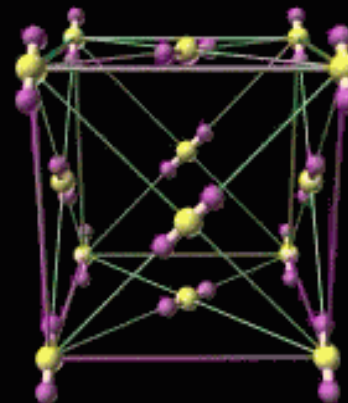
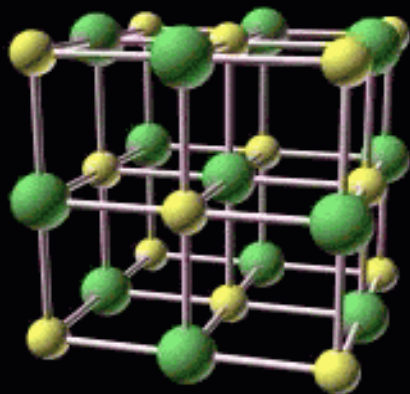
1912年4月他们开始了这项试验。弗里德利希和尼平很快地按劳厄的设计搭起了安装有实验装置的架子,但是他们在第一轮实验中,由于X射线太弱,曝光时间不足而屡遭失败。后来他们把曝光时间延为数小时,才在底片上显出有规则的斑点。他们逐步改进设备,采用ZnS、NaCl等晶体做试验,衍射斑点具有更为明显的对称性。接着,劳厄推导出一系列衍射方程,很好地解释了这些斑点的成因。



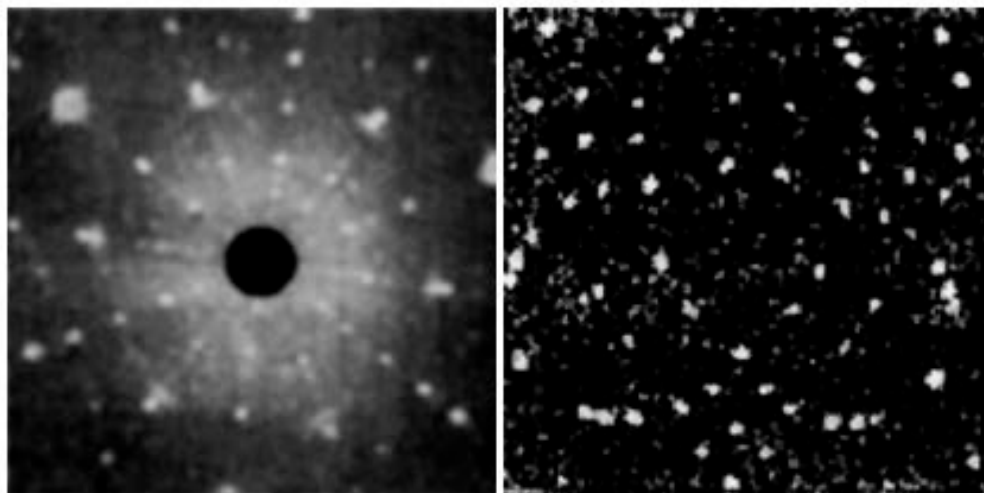
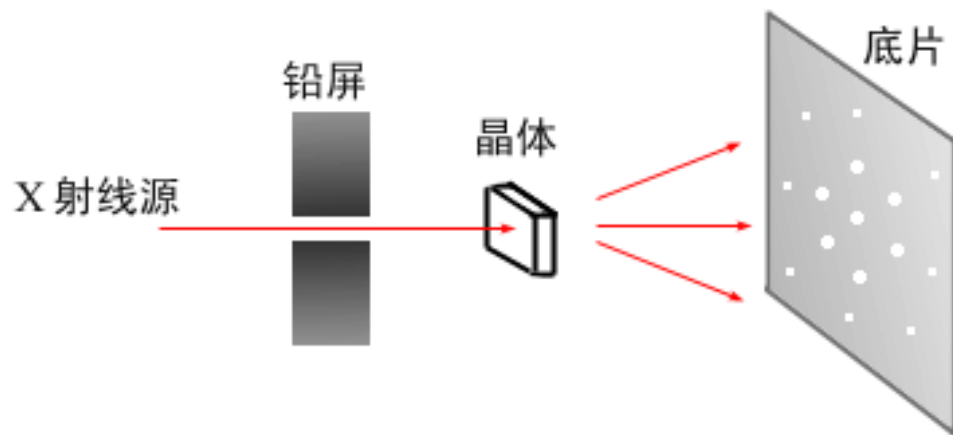
在照相底片上形成对称分布的若干衍射斑点,称为**劳厄斑**。

晶体结构

离子晶体、分子晶体、原子晶体



劳厄的实验装置

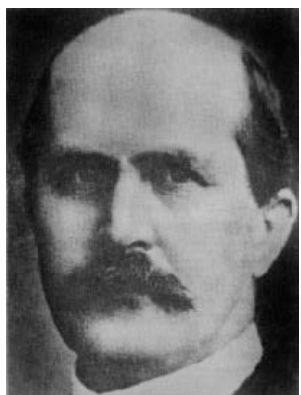


(a)

(b)

X射线通过红宝石晶体(a) 和硅单晶体(b) 所拍摄的劳厄斑照片

布拉格父子与布拉格公式



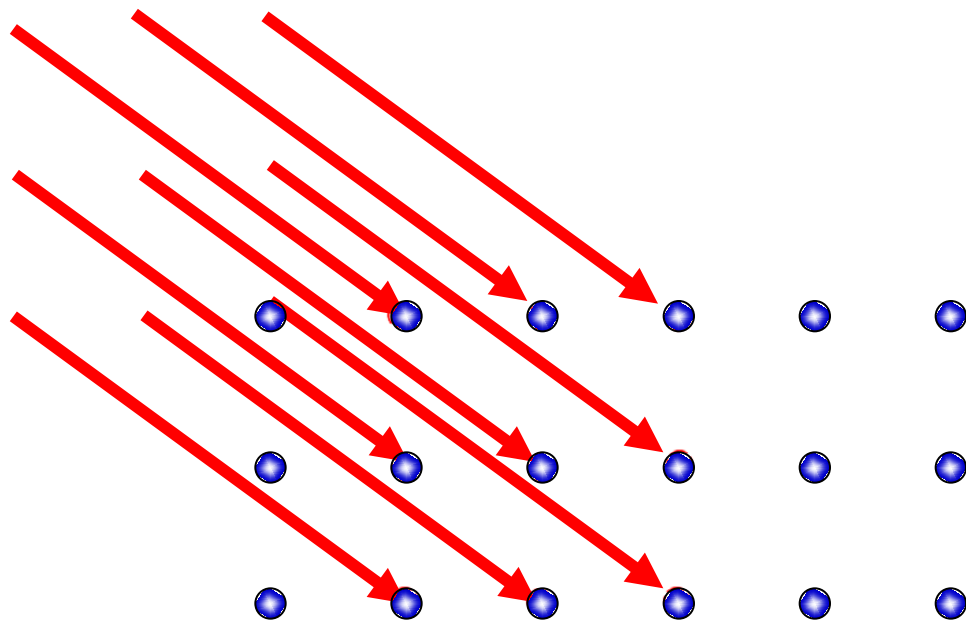
布喇格, W. H.

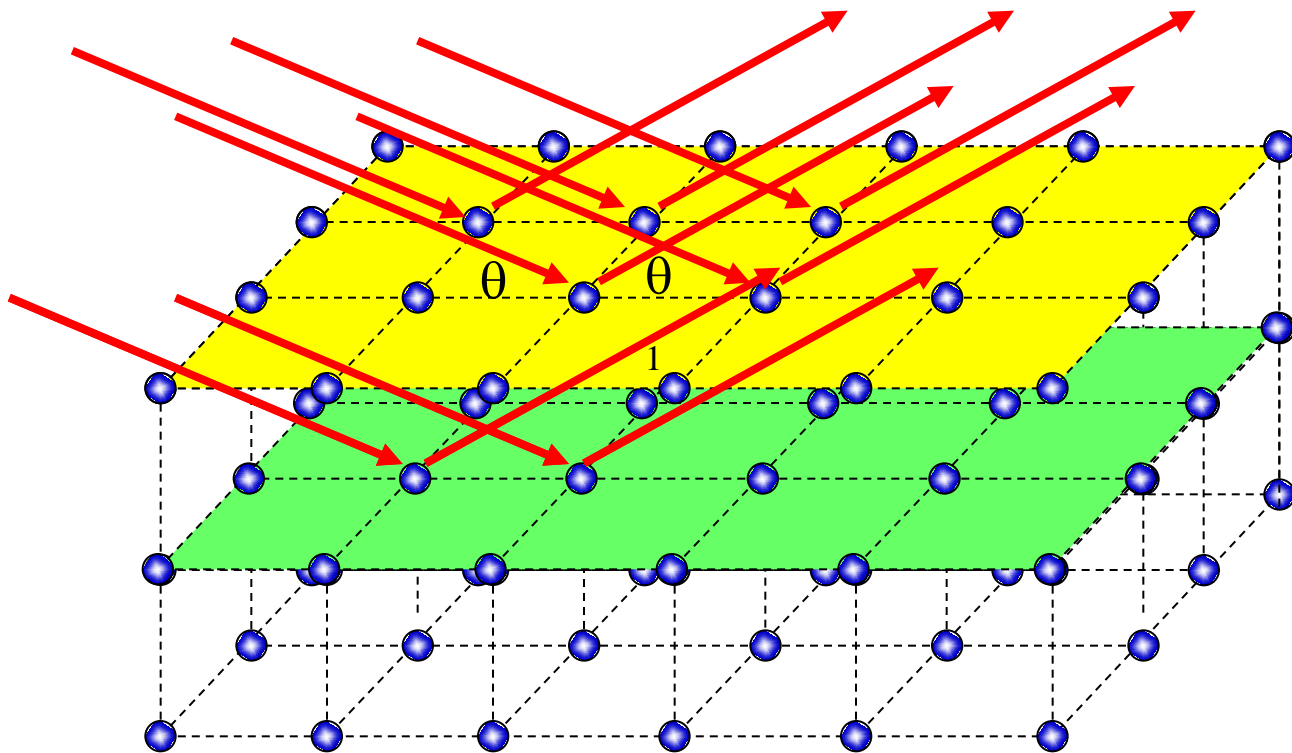


布喇格, W. L.

1915年诺贝尔物理学奖 —— X射线晶体结构分析 亨利，授予英国伦敦大学的亨利·布拉格(Sir William Henry Bragg, 1862-1942)和他的儿子英国曼彻斯特维克托利亚大学的劳伦斯·布拉格(Sir William Lawrence Bragg, 1890-1971)。

劳厄解释了劳厄斑的形成，但他的方法比较复杂。不久，英国物理学家布拉格父子提出一种比较简单的方法来说明X射线的衍射。布喇格父子认为当X射线射到晶体各层面的原子时，原子中的电子将发生受迫振荡，从而向周围发射同频率的电磁波，即产生了X射线的散射，而每个原子则是一个次波源；劳厄斑正是次波的干涉叠加的结果。

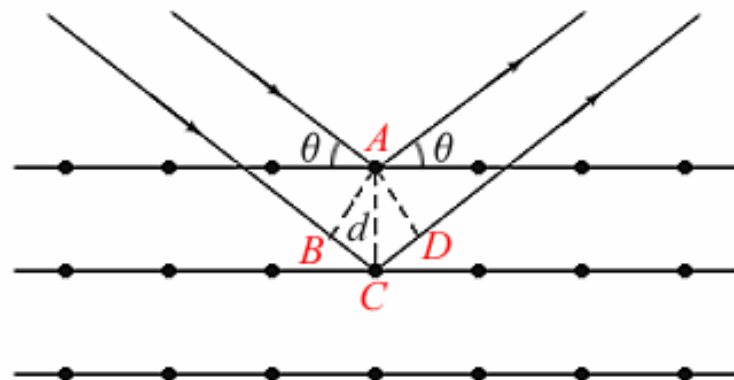
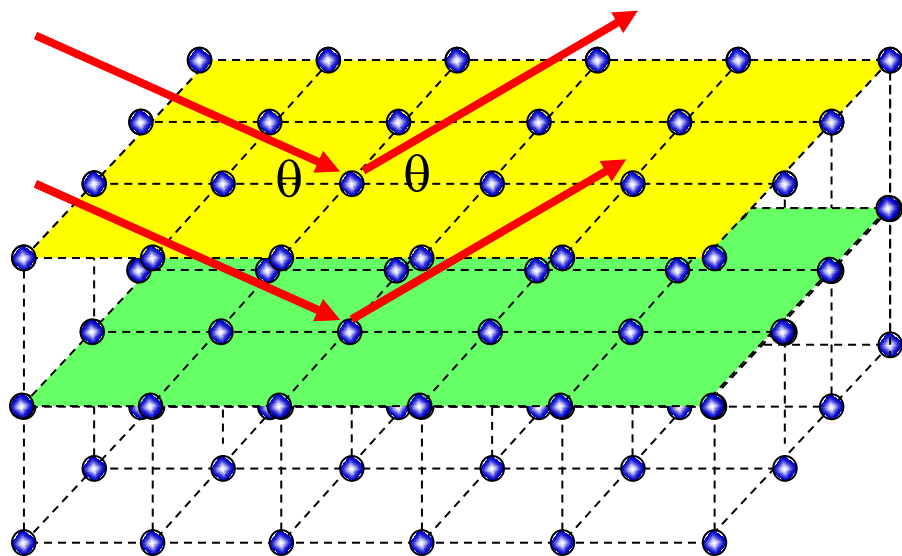




(1) 同一晶面的干涉增强：

$$l \cdot (\cos \theta - \cos \theta_1) = k\lambda$$

单层晶面的衍射遵循x方向+z方向衍射。



(2) 不同晶面之间的干涉增强

对于以 θ 角掠射的单色平行的X光束投射到晶面间距为 d 的晶面上时，在各晶面所散射的射线中，只有按反射定律反射的射线的强度为最大，上、下两晶面所发出的反射线的光程差为：

$$\delta = \overline{BC} + \overline{CD} = 2d \sin \theta$$

当 $\delta = 2d \sin \theta = k\lambda$ 时各层面上的反射光相干加强，形成亮点，称为 k 级干涉主极大。该式称为布喇格公式。

布拉格公式与一维光栅方程相似，但是也有所不同：

1. 对于一维光栅，只有一个光栅方程，而对于X-射线晶体衍射，晶体是三维光栅，有一系列不同取向的晶面，它们的晶面之间的距离不同，因此晶体的X-射线衍射有一系列的布拉格公式。
2. 对于一维光栅，任意波长的单色光照射，总可以在镜面方向得到衍射极大值。而对于晶体衍射，X-射线入射方向和晶体的位置确定后，则一系列的 d 对应的 θ 也就确定了，单色波长的X-射线不一定能满足布拉格公式，因此有可能得不到X-射线的衍射图样。