

晶体学实验报告

工物 42 李中翔 2024011032

摘要

上半学期的基础物理学课程中我们学习光学的相关内容，在光学中我们接触到了光栅这一物理结构，从日常生活中的牛肉泛绿光到实验室中晶体结构确认，光栅都在其中发挥了重要作用。本实验中先后观察一维和二维样品的衍射图案来判断样品的周期和参数，随后根据样品对称性来推测衍射图案对称性，最后根据衍射图案以及对应点的亮度通过傅里叶变换来判断样品的内部结构。

1. 实验仪器

激光器、夹子（用以保证激光器处于开启状态）、铬版、干板夹（用以固定铬版）、激光功率计、坐标纸、磁性尺、手机和直尺。

2. 实验原理及实验步骤

A) 从狭缝到晶体

对于一个光栅常数为 a 、狭缝长 b 的光栅而言，在夫琅禾费衍射条件下光强 I 和衍射角 θ 由 $I(\theta) = \frac{I_0}{N^2} [\frac{\sin(\frac{N\pi a \sin \theta}{\lambda})}{\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}}]^2 [\frac{\sin(\frac{\pi b \sin \theta}{\lambda})}{\frac{\pi b \sin \theta}{\lambda}}]^2$ 给出，其中 I_0 为 $\theta = 0$ 时光强， N 为光栅狭缝数。从而衍射的第 h 个极大值对应于 $a \sin \theta = h\lambda$ ，当 θ 较小时我们可以小量近似得到 $a\theta = h\lambda$ ，我们引入散射矢量 $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$ ，于是小量近似有 $q \approx \frac{2\pi\theta}{\lambda} = \frac{2\pi h}{a}$ ，记第一个衍射极大对应的散射矢量为 $q_1 = \frac{2\pi}{a}$ ，我们可以简化得到 $q = hq_1$ 。第 h 级衍射极大与0级主极大的距离为 S_h ，光栅与观测屏距离为 L 时，我们可以得到 $\theta \approx \frac{S_h}{L}$ ，于是有 $a = \frac{h\lambda L}{S_h}$ ，而 $q_1 = \frac{2\pi}{a}$ ，因此我们可以通过测量 S_h 和 L 来计算光栅对应的 a 和 q_1 。

在实验中分别观察样品 $DG1 \sim DG5$ 的衍射图案并用手机进行拍照记录，读出每个样品对应衍射图案的 S_h 和 L ，然后计算出相应的 a 和 q_1 。

B) 二维晶体

在如图1所示的以 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 为晶格矢量的二维晶体中我们通过画一系列过圆点的平行线，那么根据一维的情形我们可以知道垂直于平行线的方向上可以视作光栅常数为平行线间距的光栅衍射。现在我们设距离中心最近的两个光斑方向为 \mathbf{q}_1 和 \mathbf{q}_2 （如图2），结合图1和一维衍射规律可知 $q_1 = \frac{2\pi}{a_1 \sin \alpha}$, $q_2 = \frac{2\pi}{a_2 \sin \alpha}$ ，为了分别求出 q_1 和 q_2 ，我们同样对光栅与观测屏距离和衍射极大与0级主极大的距离进行测量，并利用 $\frac{2\pi S_h}{\lambda L} = hq_1$ 和 $\frac{2\pi S_k}{\lambda L} = kq_2$ 计算 q_1 和 q_2 ，进而确定晶体的晶格矢量。

在实验中我们首先测量光栅与观测屏距离 L ，然后分别对两个方向上的第 h 级衍射极大与0级主极大的距离 S_h 和第 k 级衍射极大与0级主极大的距离 S_k 进行测量，然后利用公式求出样品 $UC1 \sim UC7$ 的晶格矢量。

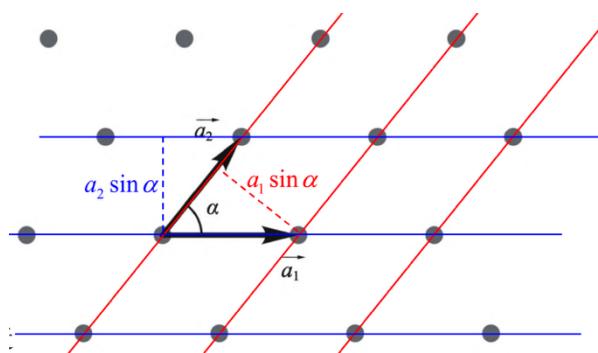


图1 二维晶体

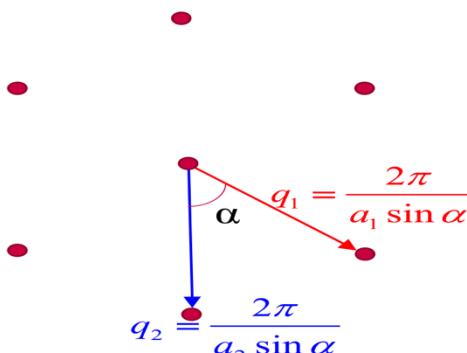


图2 二维晶体的衍射矢量

C) 晶体的对称性

在晶体中的原胞中包含许多分子，这些分子按一定规律排列会具有一定的对称性，对于衍射光斑强度分布常见的对称性有：以某条直线为对称轴的镜像对称，用该直线的方程表示；绕某条对称轴转过 $(360^\circ \cdot \frac{n}{m}, m, n \in \mathbb{Z})$ 时，能使衍射图案复原的m阶旋转对称，用 C_m 标记。

如图3所示衍射图案，可以知道该晶体具有两个互相垂直且相等的晶格矢量。该衍射图案的对称中心为 $h = 0, k = 0$ ，具有的旋转对称性和镜像对称性见表1，其镜像对称轴已经标记在图中。

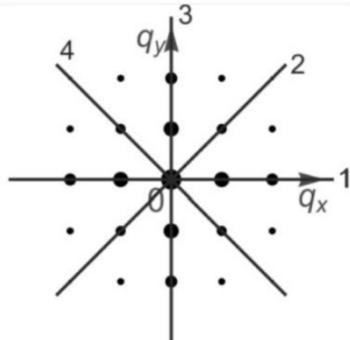


图3 二维晶体衍射图案对称性

表1 图3所示二维晶体衍射图案的对称性

对称性		衍射图案方程
旋转对称	C_1	$I(q_x, q_y) = I(q_x, -q_y)$
	C_2	$I(q_x, q_y) = I(-q_x, -q_y)$
	C_4	$I(q_x, q_y) = I(-q_y, q_x)$
镜像对称	1: $q_y = 0$	$I(q_x, q_y) = I(q_x, -q_y)$
	2: $q_y = q_x$	$I(q_x, q_y) = I(q_y, q_x)$
	3: $q_x = 0$	$I(q_x, q_y) = I(-q_x, q_y)$
	4: $q_y = -q_x$	$I(q_x, q_y) = I(-q_x, -q_y)$

我们考察更一般的二维晶体对称性，在图4中A和B是晶体中完全等价的格点，那么绕A点逆时针旋转角度 θ 后B点会变到C点，若此操作为晶体的对称操作，那么晶体和原来一致。此时将晶体绕A顺时针旋转角度 θ 后也与原来一致。由于A和B的等价性知C和D都是晶体格点，且CD与AB平行。再结合晶体的平移对称性知 $CD = na$ ，进而 $\cos \theta = \frac{1-n}{2}$ 。从而二维晶体的对称性只能属于表2中的类型。

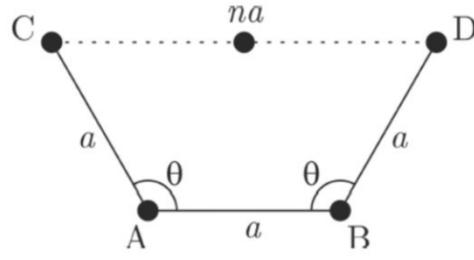


图4 二维晶体的对称性

表2 二维晶体具有的旋转对称性

n	$\cos \theta$	θ	对称性
-1	1	0°	C_1
0	0.5	60°	C_6
1	0	90°	C_4
2	-0.5	120°	C_3
3	-1	180°	C_2

在实验中我们通过手机拍摄相应的衍射图案，然后根据样品的形状推测出衍射图案应当具有的对称性，于是我们便可以通过判断对称性来将样品PG1、2、5、8与晶胞K、L、M、N进行对应，以及判断样品UC8作为晶体的可能性。

D) 相位问题

我们确定了晶体的晶格矢量和对称性后可以通过傅里叶变换进一步确定晶体的完整结构。根据傅里叶变换我们知道衍射图案的复振幅有： $F(\mathbf{q}) \sim \int \rho(r) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} dr$ ，反之有： $\rho(r) \sim \int F(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} dq$ ，当衍射光斑为离散的点时我们可以将积分形式改作求和形式： $\rho(r) \sim \sum |F(\mathbf{q})| e^{i\varphi} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ ，在实验中我们只需要对较亮的点进行求和，而对于 $|F(\mathbf{q})|$ 我们只需要测量出斑点的强度 $I(\mathbf{q})$ 。关于相位 φ 我们可以选取与待测晶体相似的晶体相位作为初始相位并利用求和形式得到 $\rho(r)$ ，之后利用傅里叶变换求出 $F(\mathbf{q})$ 得到新的相位，依此方法反复进行直至收敛。

在本实验中我们利用样品MR0的相位作为初始相位，观察并拍摄样品MR1的衍射图案，通过测量衍射图案以中心亮斑为中心的一个 5×5 范围内亮斑的光强来对样品MR1的晶胞结构进行判断。

3. 数据处理

A) 从狭缝到晶体

A.1 观察光栅（一维晶体）样品 DG1~DG5 的衍射图样，测试并记录数据，确定每个样品的 q_1 和 a 。

本实验中光栅与观测屏距离 $L = 57.3 \text{ cm}$ ，激光笔产生激光波长 $\lambda = 650 \text{ nm}$ 。根据所得衍射图案测量并计算可知：

样品 DG1 的衍射图案中 $S_1 = 18 \text{ mm}$ ，于是 $q_1 = \frac{2\pi S_1}{L\lambda} \approx 3.04 \times 10^5 \text{ m}^{-1}$ ，进而 $a = \frac{2\pi}{q_1} \approx 20.69 \mu\text{m}$ 。

样品 DG2 的衍射图案中 $S_1 = 8 \text{ mm}$ ，于是 $q_1 = \frac{2\pi S_1}{L\lambda} \approx 1.35 \times 10^5 \text{ m}^{-1}$ ，进而 $a = \frac{2\pi}{q_1} \approx 46.56 \mu\text{m}$ 。

样品 DG3 的衍射图案中 $S_1 = 5 \text{ mm}$ ，于是 $q_1 = \frac{2\pi S_1}{L\lambda} \approx 8.43 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ ，进而 $a = \frac{2\pi}{q_1} \approx 74.49 \mu\text{m}$ 。

样品 DG4 的衍射图案中 $S_1 = 5 \text{ mm}$ ，于是 $q_1 = \frac{2\pi S_1}{L\lambda} \approx 8.43 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ ，进而 $a = \frac{2\pi}{q_1} \approx 74.49 \mu\text{m}$ 。

样品 DG5 的衍射图案中 $S_1 = 5 \text{ mm}$ ，于是 $q_1 = \frac{2\pi S_1}{L\lambda} \approx 8.43 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ ，进而 $a = \frac{2\pi}{q_1} \approx 74.49 \mu\text{m}$ 。

由于测量精度有限，因此对于样品 DG3~5 的晶格矢量差距无法显现出来。

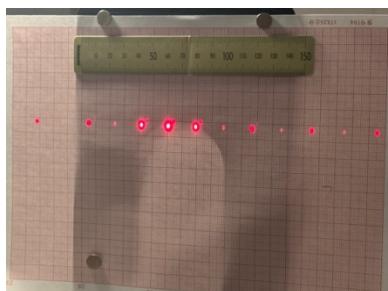


图 5 样品 DG1 衍射图案



图 6 样品 DG2 衍射图案



图 7 样品 DG3 衍射图案

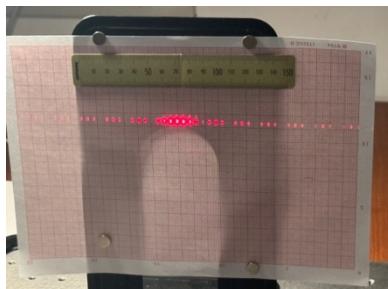


图 8 样品 DG4 衍射图案

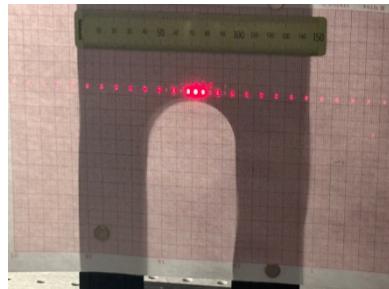


图 9 样品 DG5 衍射图案

B.1 观察样品 UC1~UC4 的衍射图样测试并记录数据，确定 a_{UC1} 、 a_{UC2} 、 a_{UC3} 和 a_{UC4} 。

本实验中光栅与观测屏距离 $L = 57.3 \text{ cm}$ ，激光笔产生激光波长 $\lambda = 650 \text{ nm}$ 。根据所得衍射图案测量并计算可知：

样品 UC1 的衍射图案中 $S_1 = 12 \text{ mm}$ ，于是 $a_{UC1} = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 31.04 \mu\text{m}$ 。

样品 UC2 的衍射图案中 $S_1 = 18 \text{ mm}$ ，于是 $a_{UC2} = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 20.69 \mu\text{m}$ 。

样品 UC3 的衍射图案中 $S_2 = 36 \text{ mm}$ ，于是 $a_{UC3} = \frac{2L\lambda}{S_2} \approx 20.69 \mu\text{m}$ 。

样品 UC4 的衍射图案中 $S_1 = 12 \text{ mm}$ ，于是 $a_{UC4} = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 31.04 \mu\text{m}$ 。



图 10 样品UC1衍射图案

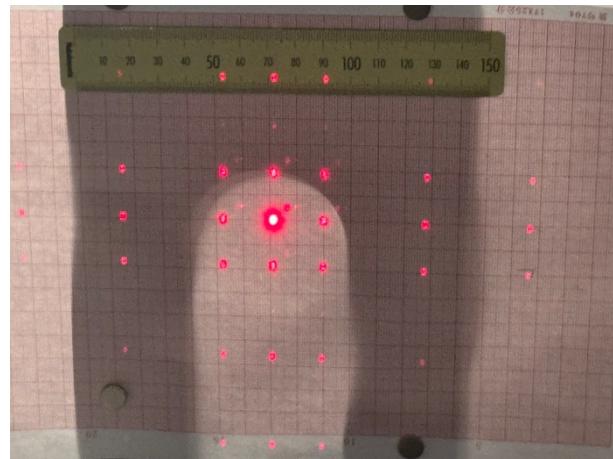


图 11 样品UC2衍射图案



图 12 样品UC3衍射图案

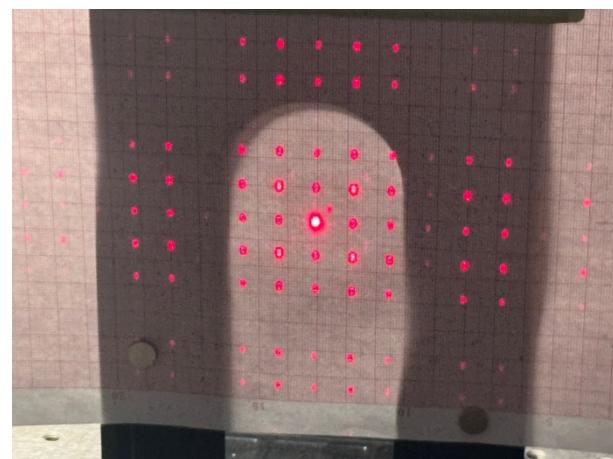


图 13 样品UC4衍射图案

B.2分析并确定样品UC1~UC4与图 14 中各个晶胞的对应关系。

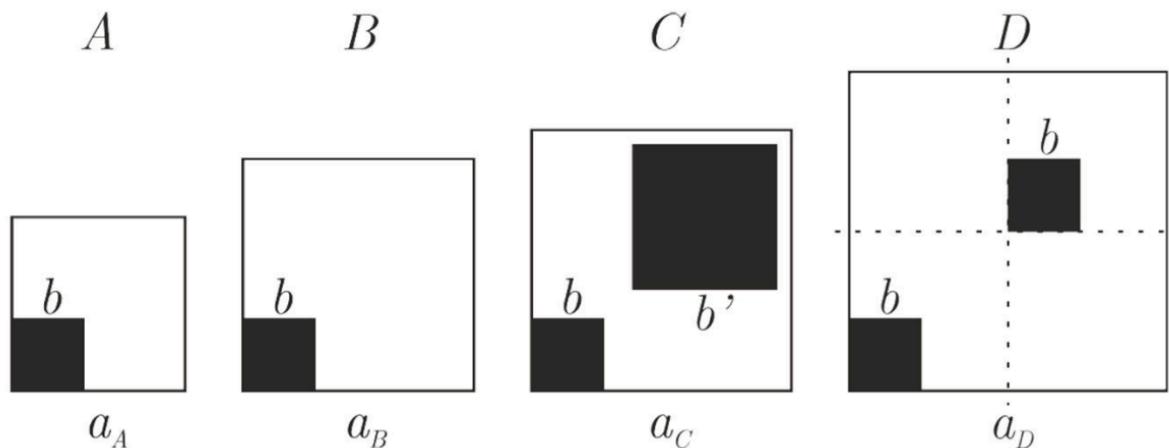


图 14 A~D这 4 个二维晶体的晶胞都是正方形，除 $a_B > a_A$ 外，其他尺寸比都未知

由于 $a_B > a_A$, 因此 A 对应于晶格矢量较小的 $UC2$ 或 $UC3$, B 对应于晶格矢量较大的 $UC1$ 或 $UC4$, 而 C 、 D 对应大晶胞内部通光率必然都小于 B , 因此中心亮斑更亮的 $UC1$ 必然对应于 B 。

为了进一步确定晶胞结构, 我们注意到 D 的结构可以由两个 A 结构和两个完全透光部分构成, 于是我们可以叠加得到 D 的结构因子会相对于 A 而言多出 $(1 + e^{i\pi(h+k)})$ 部分, 这意味着相对于 A 所产生的衍射图像而言, D 对应的衍射图像会在 $h + k$ 为奇数时出现缺级, 而这恰好对应于 $UC3$, 进而 A 只能对应于 $UC2$ 。

因此根据上述的分析我们得到 $UC1$ 对应 B , $UC2$ 对应 A , $UC3$ 对应 D , $UC4$ 对应 C 。

B.3 观察样品 $UC5 \sim UC7$ 的衍射图样, 确定各个样品的参数 a_1 、 a_2 及其夹角 α 。

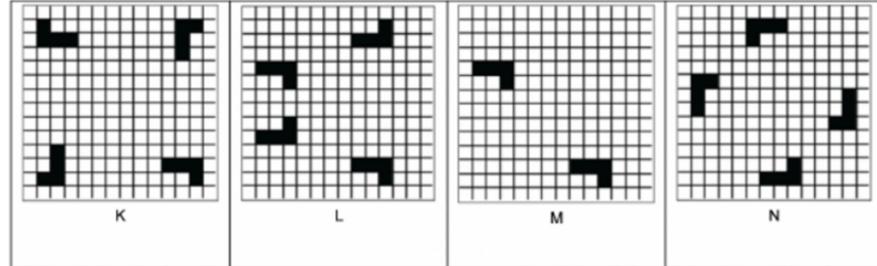
本实验中光栅与观测屏距离 $L = 57.3 \text{ cm}$, 激光笔产生激光波长 $\lambda = 650 \text{ nm}$ 。由于直接在衍射图案上进行角度的测量较为繁琐且误差较大, 因此对于角度测量可以利用 http://www.ginifab.com/feeds/angle_measurement/online_protractor_zh-cn.php 网站的在线量角器, 将衍射图案的图片导入后可直接选取三点进行测量角度。对于长度的测量我们利用软件 ImageJ 对衍射图案的图片中 10 个小格边长标定为 1 cm , 然后对图片中距离进行测量则可以得到距离的实际大小。根据所得衍射图案测量并计算可知:

样品 $UC5$ 的衍射图案中 $S_1 = 18.4 \text{ mm}$, $s_1 = 8.8 \text{ mm}$, 于是 $a_1 = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 20.24 \mu\text{m}$, $a_2 \approx 42.32 \mu\text{m}$, 角度测量得 $\alpha = 90^\circ$ 。

样品 $UC6$ 的衍射图案中 $S_1 = 9.8 \text{ mm}$, $s_1 = 18.0 \text{ mm}$, 于是 $a_1 = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 38.00 \mu\text{m}$, $a_2 \approx 20.69 \mu\text{m}$, 角度测量得 $\alpha = 66^\circ$ 。

样品 $UC7$ 的衍射图案中 $S_1 = 9.7 \text{ mm}$, $s_1 = 10.6 \text{ mm}$, 于是 $a_1 = \frac{L\lambda}{S_1} \approx 35.10 \mu\text{m}$, $a_2 \approx 35.11 \mu\text{m}$, 角度测量得 $\alpha = 60^\circ$ 。

C.1 说明下图所示晶胞形成的晶体具有哪些对称性。在图上画出镜像对称轴, 在图下方标明旋转对称性。



对于四个晶胞的对称性类型见图 15。

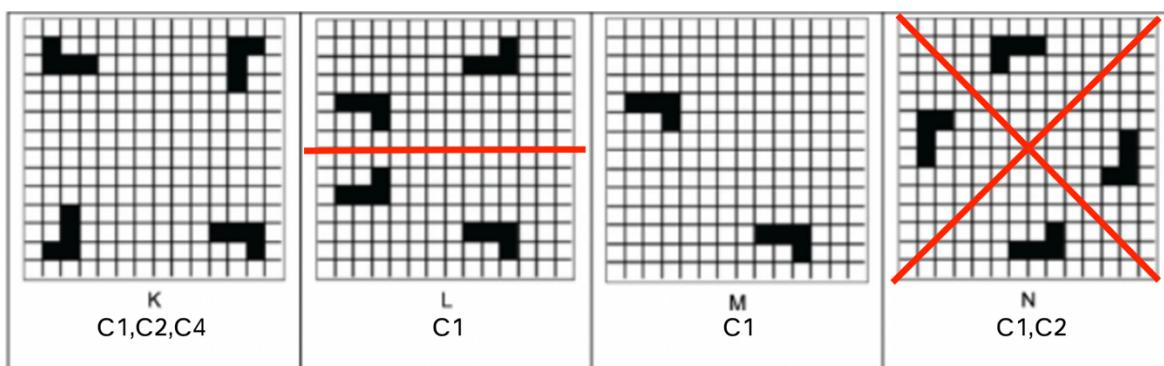


图 15 晶胞对称性

C.2 观察样品PG1、2、5、8的衍射图样，确定这些衍射图样有何对称性，并分析它们与晶胞K、L、M、N之间的对应关系。

对于衍射图案的对称性分析如下：

样品PG1具有 $q_y = 0$ 镜像轴，对应于L。

样品PG2无明显对称性，对应于M。

样品PG5具有 $q_x = q_y$ 和 $q_x = -q_y$ 镜像轴，对应于N。

样品PG8具有 C_4 对称性，对应于K。

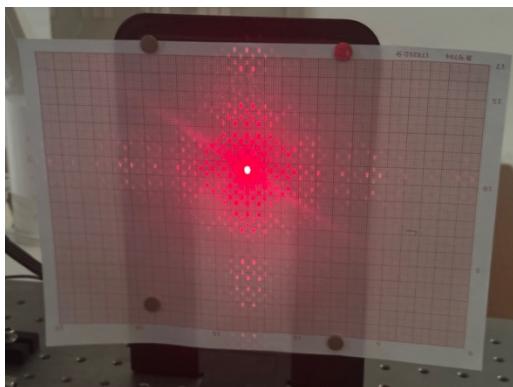


图 16 样品PG1衍射图案

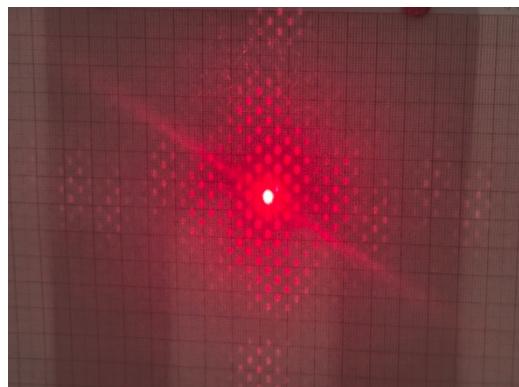


图 17 样品PG2衍射图案

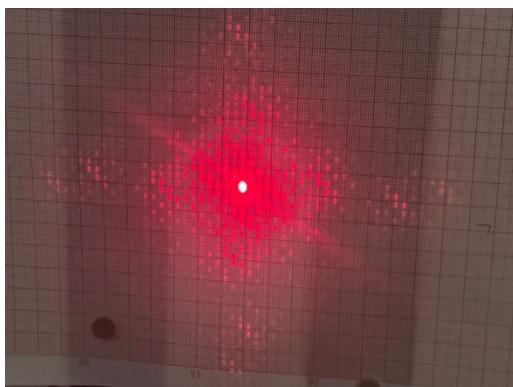


图 18 样品PG5衍射图案

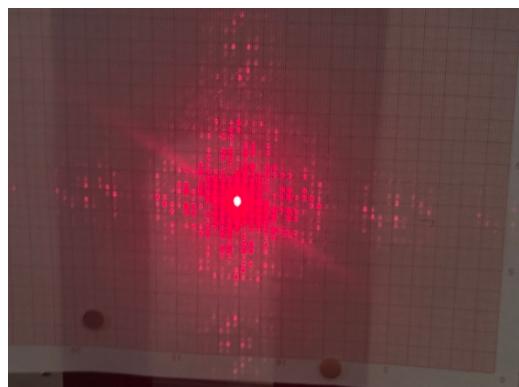


图 19 样品PG8衍射图案

C.3 观察样品UC8的衍射图样。它可能是晶体吗？请说明原因。

样品UC8产生的衍射图案（图 20）具有 C_{10} 对称性，但是这将无法具有平移对称性，因此它不是晶体。

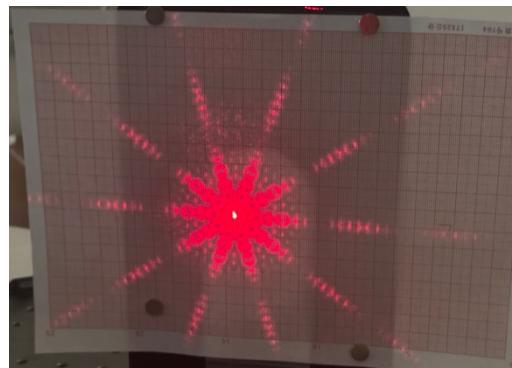


图 20 样品UC8衍射图案

D.1 观察样品MR1的衍射图样。确定晶体MR1的晶胞是下图中的哪一个。



本实验中我们利用样品MR0的部分衍射光斑相位（图21）作为初始相位，测量出以中心亮斑为中心的一个 5×5 亮斑区域内的光强得到表3。

	2	3.142	0.4636	0	-0.4636	3.142
	1	0	-0.4636	2.034	-1.571	0
	0	3.142	-1.571	0	1.571	3.142
k	-1	0	1.571	-2.034	0.4636	0
	-2	3.142	0.4636	0	-0.4636	3.142
		-2	-1	0	1	2
		h				

图21 样品MR0部分衍射光斑相位

表3 亮斑区域强度分布

k	2	6.6	31.5	0.3	33.4	7.1
	1	36.5	27.2	16	0.3	38.7
	0	0.2	16.9	334.5	15.8	0.3
	-1	35.5	0.4	17.7	22.3	33.8
	-2	7.6	36.6	0.4	29.7	7.7
		-2	-1	0	1	2
		h				

我们利用 $I(q)$ 取代 $|F(q)|$ ，在 5×5 亮斑区内计算 $\rho(r) \sim \sum |F(q)| e^{i\varphi} e^{-iq \cdot r}$ ，从而我们可以得到样品的透射率分布（见表4），其中透射率较小的部分我们将其所在表格涂上灰色。经过比对后可以发现样品MR1对应于X。

表4 样品透射率分布

γ	3	4.685	9.430	34.390	-9.437
	2	-1.073	53.517	-24.243	64.345
	1	8.121	41.892	60.323	-12.530
	0	57.439	4.642	-1.285	2.415
		0	1	2	3
		χ			

4. 分析讨论

a) 在分析对称性时由于需要仔细比对各个位置的亮斑来确定对称性的存在性，所以笔者试图通过Matlab进行衍射图像的预测，由于刚好样品的图案是非黑即白的方格，因此可以直接构建其结构对应的二维数组，具体的代码为：

```
N=1000
f=zeros(13, 13);
f(2:2, 6:8)=1;
f(3, 6)=1;
f(12:12, 6:8)=1;
f(11, 8)=1;
f(6:8, 2:2)=1;
f(6, 3)=1;
```

```

f(7:9, 12:12)=1;
f(9, 11)=1;
subplot(2, 3, 1);
imshow(f);
title('N孔');
g= fft2(f);
subplot(2, 3, 2);
imshow(real(g));
title('fft2 生成的"频域"图像');
S=abs(g);
subplot(2, 3, 3);
imshow(S);
title('傅里叶频谱');
Fc=fftshift(real(S));
subplot(2, 3, 4);
imshow(Fc);
title('居中的频谱');
S2=log(1+abs(Fc));
subplot(2, 3, 5);
imshow(S2);
title('使用对数变换进行视觉增强后的频谱');

```

实现的效果图为：

这个原始模型中，只考虑了一个晶胞。没有考虑晶体的周期性。算出来的相当于单缝衍射调制项。而主要的衍射来自于晶体的周期性。可以尝试将该模型周期化，多加一些周期。再做FFT看看效果。

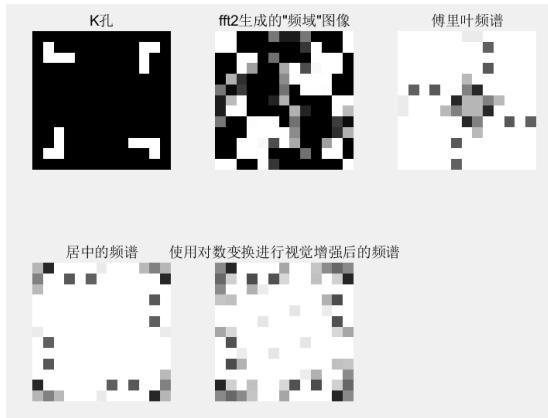


图 22 K 孔模拟效果

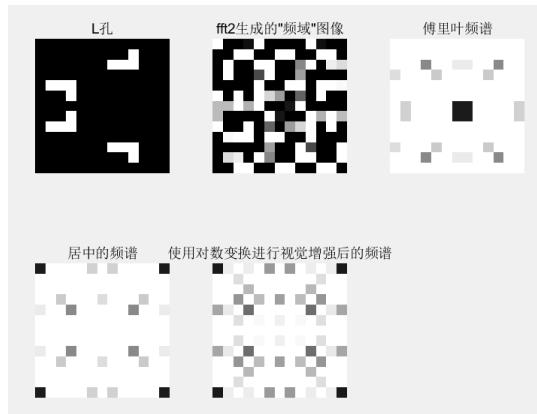


图 23 L 孔模拟效果

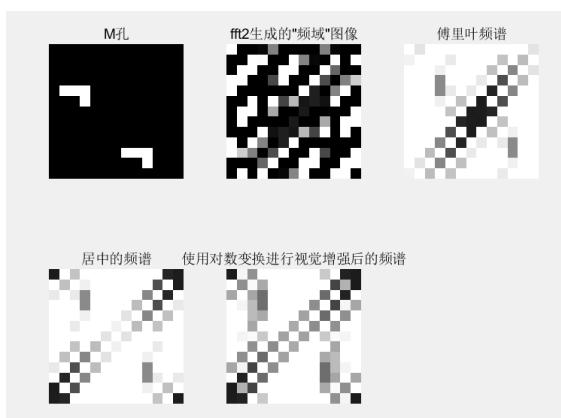


图 24 M 孔模拟效果

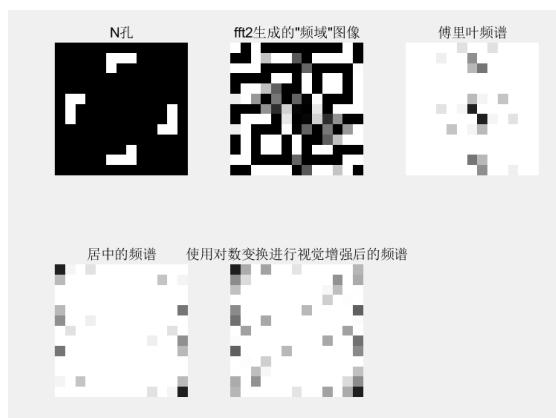


图 25 N 孔模拟效果

我们可以发现由 13×13 产生的模拟效果和真实的图像还是有较大差距的，因此我们将像素数量进行改进，分别将其改为 130×130 和 1300×1300 ，得到图 26 和图 27。

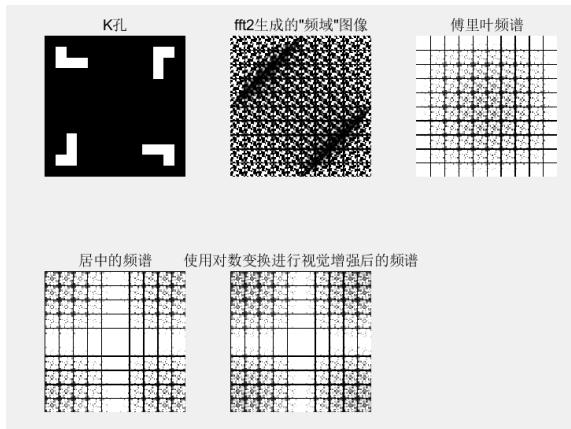


图 26 K 孔在 130×130 下效果模拟

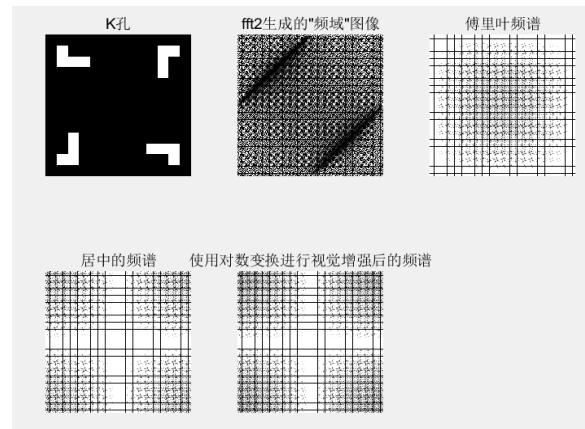


图 27 K 孔在 1300×1300 下效果模拟

因此当我们提高像素数量时模拟图会不断接近实验观察到的图像，因此在进行判断时由于对称性相对来说比较难以判断（在众多光斑中找对称的光斑还是相对困难的），我们可以通过Matlab进行模拟，然后将图像进行比对。

b) 在实验探究相位问题时我们也可以考虑使用上面讨论的方法进行Matlab的模拟，结果如下：



图 28 X 孔模拟情况

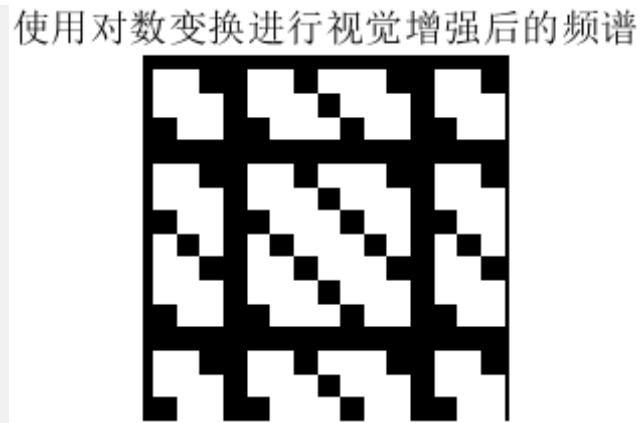


图 29 X 孔模拟情况（改进后）

我们可以发现图 29 和我们真实观察到的图像还是很接近的，因此我们在精度要求不是很高的情况下使用Matlab进行模拟，然后和衍射图案进行比对，这样避免了较为复杂的强度测量和结构因子计算。

5. 原始数据

(k)						
2	3.1420	0.4636	0.0000	-0.4636	3.1420	
1	0.0000	-0.4636	2.0340	-1.5710	0.0000	
0	3.1420	-1.5710	0.0000	1.5710	3.1420	
-1	0.0000	1.5710	-2.0340	0.4636	0.0000	
-2	3.1420	0.4636	0.0000	-0.4636	3.1420	
	-2	-1	0	1	2	(h)

D.2 晶体各衍射斑点强度测试值

(k)						
-2	6.6	31.5	0.3	33.4	7.1	
1	36.5	27.2	16	0.3	38.7	
0	0.2	16.9	334.5	15.8	0.3	
-1	35.5	0.4	17.7	22.3	33.8	
-2	7.6	36.6	0.4	29.7	7.7	
	-2	-1	0	1	2	(h)

晶胞的振幅透射率记录表格

(γ)					
3	4.685	9.430	34.390	-9.437	
2	-1.073	53.517	-24.243	64.345	
1	8.121	41.892	60.323	-12.530	
0	57.439	4.642	-1.285	2.415	
	0	1	2	3	(χ)

计算晶胞的振幅透射率: 输入χ、γ, 计算透射率

χ	0	2.569046	-5.02008	-0.54772	-5.16926	2.664582298
γ	1	3.7E-16	-2.33216	3.578503	-0.54772	3.80922E-16
透射率	8.1211	-0.44721	-0.00084	18.28934	-0.00081	-0.547722512
		3.65E-16	-0.63246	3.763812	-2.11167	3.55991E-16
		2.75681	-5.41123	-0.63246	-4.87454	2.774887155