

微波布拉格衍射实验

1913年，英国物理学家布拉格父子在研究 X 射线在晶面上的反射时，得到了著名的布拉格公式。从而奠定了X射线结构分析的基础。本实验用一束波长 $\approx 3\text{cm}$ 的微波代替X射线，观察它照射到人工制作的晶体模型时的衍射现象，用来模拟X光在真实晶体上的布拉格衍射，并验证布拉格公式。

【实验目的】

1. 了解微波的产生及其性质。
2. 通过实验方法学习微波的布拉格衍射理论，了解衍射法分析晶体结构的基础。
3. 更深刻地认识波的本质。

【实验仪器及仪器介绍】

DHMS—1 型微波光学综合实验仪（包括：X 波段微波信号源、微波发生器、发射喇叭、接收喇叭、微波检波器、检波信号数字显示器、可旋转载物平台和支架，以及实验用附件(反射板、分束板、单缝板、双缝板、晶体模型、读数机构等)）。

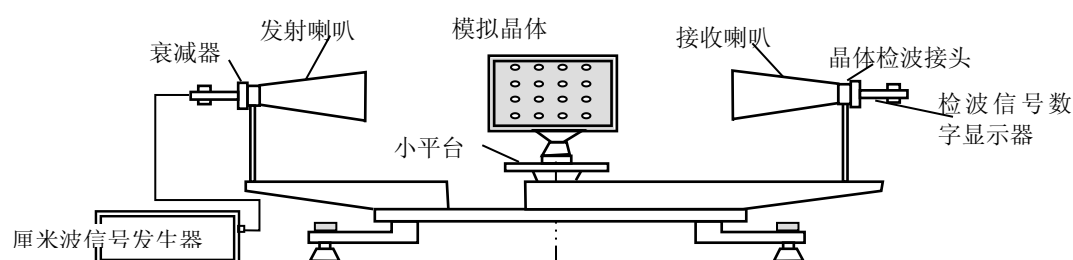


图 1 微波布拉格衍射原理图

【实验原理】

微波是波长 $1\text{mm} - 1\text{m}$ （频率范围 $3 \times 10^2 \text{ MHz} - 3 \times 10^5 \text{ MHz}$ ）的电磁波，在电磁波谱中介于超短无线电波（电视波）和远红外线之间。实验使用的微波发生器是采用电调制方法实现的，其内部有一个电压可调的压控振荡器（VCO），再经过滤波器、衰减器、放大器、隔离器等从发射喇叭（天线）输出 $8.8\text{GHz} - 9.8\text{GHz}$ （波长范围 $3.0 - 3.4\text{cm}$ ）的微波。接收部分采用检波/数显一体化设计，由接收喇叭（天线）接收微波信号，传

给高灵敏度的检波管后转化为电信号，通过穿心电容送出检波电压，再通过 A/D 转换，由液晶显示器显示微波相对强度。

晶体点阵上的格点，按一定的对称规律周期地重复排列在空间三个方向上。因此晶体的立体点阵可以用一系列间距相等的平行晶面族来表示，如图 2 (a)。布拉格公式中的 d 值就是这样的晶面族中相邻两晶面的间距。晶体点阵中的平行晶面族有许多种取法，每种取法有着特定的晶面法线方向。晶面法线方向的矢量代表着晶面的取向。图 3 就画出了二维点阵中一些晶面族的取法。

原子所在的平面称为晶面，晶面的方位用米勒指数标记。设某一原子晶面在基矢 a, b, c 方向的截距为 ra, sb, tc ，将系数 r, s, t 的倒数 $\frac{1}{r}, \frac{1}{s}, \frac{1}{t}$ 简约成互质的整数 $h, k, l, h:k:l = \frac{1}{r}:\frac{1}{s}:\frac{1}{t}$ ，并用圆括号包括成 (hkl) ，就是这一晶面的米勒指数。该平面族就称为 (hkl) 晶面族。

例如，某平面在三个坐标轴上的截距分别为 $x=3, y=4, z=2$ （见图 2 a），取倒数再化做互质的整数即：

$$\frac{1}{3}:\frac{1}{4}:\frac{1}{2} \Rightarrow \frac{4}{12}:\frac{3}{12}:\frac{6}{12} \Rightarrow 4:3:6$$

所以此平面的米勒指数为 (436) ，即此平面的平行晶面族记为 (436) 。

在确定米勒指数时，应注意下列两个规定：

①和坐标轴平行的晶面，该坐标轴指数为零。例如：与 X 轴平行的晶面族中，每个晶面与 X 轴都相截于 ∞ 。

②紧邻原点的晶面和坐标轴相截于负方向时，该坐标的指数取作负值，并将负号标在指数上方，如 $(\bar{h}kl)$ 。且 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 代表同一晶面族。它们不过分别是通过原点晶面的左右邻而已。

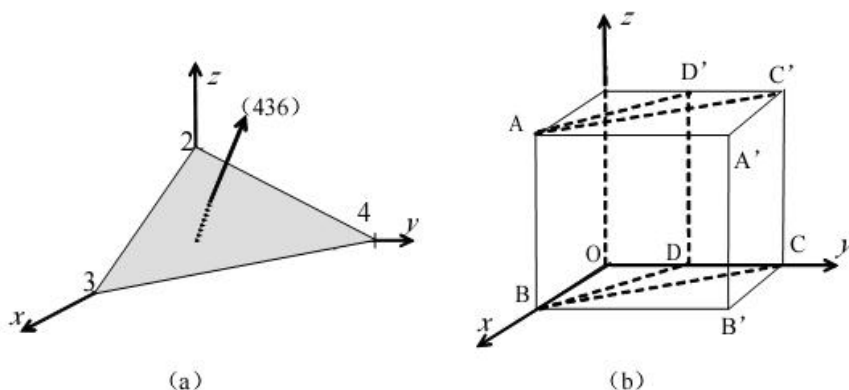


图2 用米勒指数表示平面

又如图2 (b)所示, 平面 $ABB'A'$ 在三个坐标轴上的截距为 $x=1, y=\infty, z=\infty$, 所以米勒指数为(100)。 $ABCC'$ 平面的截距是 $x=1, y=1, z=\infty$ 的, 所以米勒指数为(110)。依此类推, 平面 $ABDD'$ 的米勒指数为 (120)。

我们略去晶胞的空间结构, 俯视图3 (b) 所示的点阵, 可得立方晶体在 x - y 平面上的投影如图3 (c) 所示。实线表示(100)平面与 x - y 平面的交线, 虚线与点划线分别表示 (110) 面及 (120) 面与 x - y 平面的交线。其它晶面族米勒指数记法类推。对于立方晶系, $d_{100} = d_{010} = d_{001} = a$, a 称作晶格常数, 对于简单立方结构的晶体来说就是单位立方体的边长。实际晶体的晶格常数在 10^{-10}m , 与 X 射线的波长数量级相当。可以证明各晶面族的面间距计算公式为:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1)$$

$$\text{如 (110) 晶面族间距为 } d_{110} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

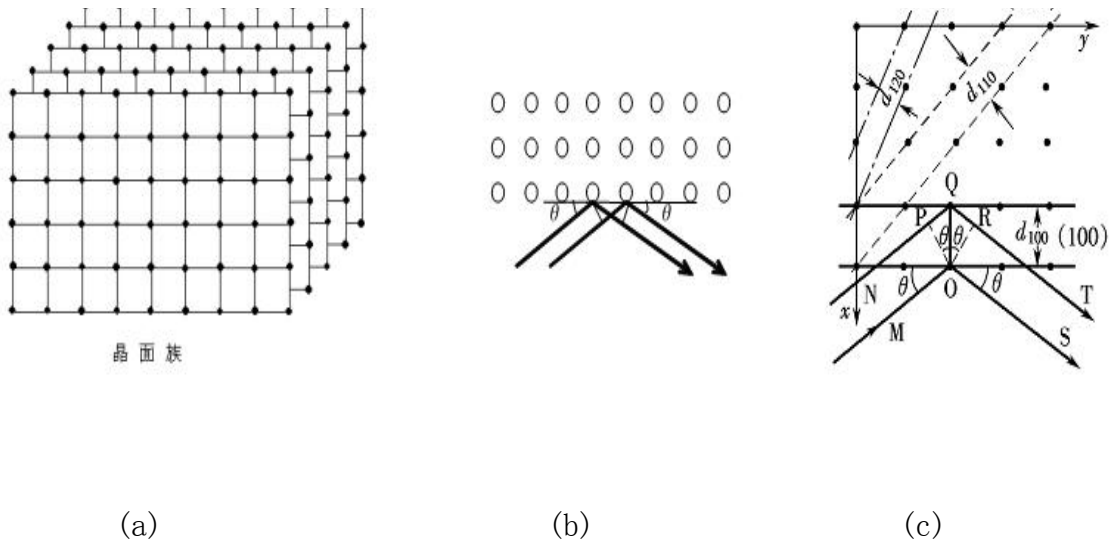


图3 二维晶面及晶体散射

x 射线投射到晶体上时, 除了要引起晶体表面平面点阵的散射外, 还要引起晶体内部平面点阵的散射, 全部散射线相互干涉后产生衍射条纹。如图3, 小圆点表示晶体点阵 (原子或离子), 当射线投射到晶体上时, 按照惠更斯原理, 所有点阵上格点成

次级子波的波源，向各方向发射散射波。产生于同一层点阵的散射线，在满足散射线与晶面之间夹角等于掠射角时，它们之间光程差为零，如图 3（b）所示。由于相干的结果，在这方向上光强最大。

不同层散射光的光程差一般不同，如图 3（c）所示。在某些方向上它们之间的光程差为波长的整数倍，此时散射线相干加强形成亮纹。设相邻散射平面点阵的间距为 d ，则从两相邻平面点阵散射出来的 x 射线之间出来的光程差为 $PQ + QR = 2d \sin \theta$ ，所以相干加强的条件为：

$$2d \sin \theta = k\lambda \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

此式即为布拉格衍射公式。式中 λ 为 X 射线的波长， θ 为掠射角（投射射线与晶面之间的夹角）， k 为干涉级数。它也是我们的微波布拉格衍射实验的基本公式。

本实验是仿照 X 射线入射真实晶体发生衍射的基本原理，人为地制作了一个方形点阵的模拟简立方晶体。用微波代替 X 射线，以模拟简立方晶体代替真实的晶体，让微波入射模拟简立方晶体，观察从晶面上点阵的反射波产生干涉应符合的条件。布拉格公式中 θ 角可由微波分光计上的分度转台测出，干涉级数 n 可由实验数据确定。因此，如果已知微波波长 λ 可求得晶格常数 a ，以研究晶体的结构。

如图 3（c）所示，今有一束平行的微波入射（100）平面族，根据 x 射线的布拉格衍射公式（2），若实验测得掠射角 θ ，则从已知的微波波长 λ 可求晶面族间距 d_{100} 。反之若知晶面族的间距，可求微波的波长。

【实验内容】

1. 仪器的调节

仪器底座要保证水平，因仪器相互干扰较大，所有位置都是精心调试定位的，所以不要随意挪动仪器。载物台上先不放任何物体，将“功率调节”旋钮顺时针转到满偏，此时功率最小。打开微波信号发生器电源，预热 10 分钟。转动载物台使发射臂对准 0° 线，接收臂对准 180° 线。预热后按下接收喇叭后面的毫伏表电源，数字显示屏显示接收到的微波强度，调整发射臂的发射功率使接收强度达到 180 左右，以保证现象明显。观察两个喇叭是否同轴等高，且通过分光计中心，否则进行必要的调整，调整时各螺钉不要过于用力，以免损坏。除目测之外，在发射与接收臂共线的情况下（分别对准 $0^\circ - 180^\circ$ 线），可以依次微调发射喇叭和接收喇叭的水平角度使接收信号最强。

2. 验证布拉格公式

将仪器按图 4(a) 摆放，(100) 面与 90° 线平行，测量立方晶体 (100) 面衍射强度。

$0^{\circ} - 180^{\circ}$ 连线是它(100)面的法线, 测量时转动晶体 C 和接收臂时保证入射波与反射波遵守反射定律, 即入射角等于反射角, 两臂始终以 $0^{\circ} - 180^{\circ}$ 连线为轴对称。掠射角 θ 测量范围分两段: 20° 到 27° , 47° 到 58° , 掠射角每改变 1° 测一个强度值 I , 数据记入表 1 中并找出第 1、2 极衍射极大值对应的 θ_1 和 θ_2 。

注意: 此仪器发射臂不能转动, 只能通过转动载物台来转动晶体, 再通过转动接收臂来调整接收角度。实验中要保证发射与接收线满足反射定律, 即入射角等于反射角, 所以相对固定的发射臂来说, 晶体每转动 1° , 接收臂就要同向转动 2° , 相当于晶体不动, 发射与接收臂相对于晶体各转动了 1° 。

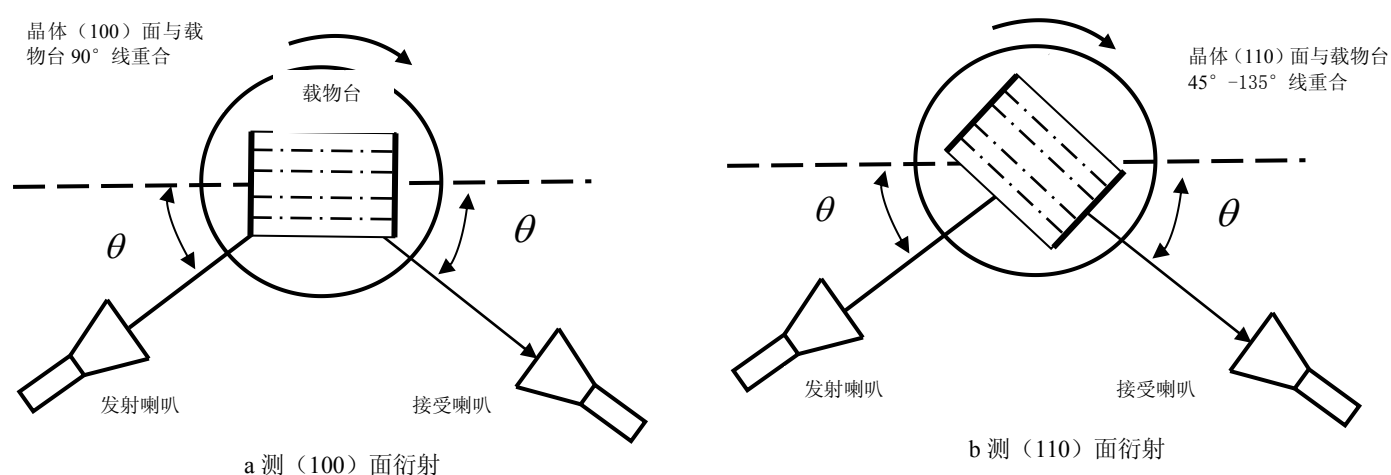


图 4 布拉格衍射示意图

3. 测量立方晶体的晶格常数

①关闭电源休息一下, 再启动信号发生器继续实验。

②在图 4 (a) 中, 将晶体旋转 45° , 如图 4 (b) 所示, 110 面 (即正方形点阵的对角线, 注意不是晶体外壳的对角线) 与一条 $45^{\circ} - 135^{\circ}$ 线重合, 而另一条 $45^{\circ} - 135^{\circ}$ 线即为 (110) 面的法线。测量 (110) 面的衍射强度, 范围从 26° 到 40° , 每隔 1° 测一个强度值, 记录在表 2 中。

③用直尺测量模拟晶体的晶格常数 a_0 ($=d_{100}$, 本实验用的模拟立方晶体晶格常数 $a_0=4\text{cm}$)。

④找到 (110) 面的 1 级衍射极大值对应的掠射角 θ 。用布拉格公式计算晶面间距和晶格常数 a_0 并与实际测量值对比。

【数据记录与处理】

(1) 验证布拉格公式

表 1 (100) 晶面族衍射强度测量结果

衍射角 $\theta/^\circ$	20	21	22	23	24	25	26	27	47	48
衍射强度 I										
衍射角 $\theta/^\circ$	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
衍射强度 I										

在坐标纸上画出 I- θ 曲线，并标出第 1、2 级衍射极大值对应的掠射角 θ_1 和 θ_2 ，并与计算值相比较：

实验结果： $\theta_1 =$ $\theta_2 =$

$$\text{计算值： } \theta_1 = \arcsin \frac{\bar{\lambda}}{2d_{100}} = \theta_2 = \arcsin \frac{\bar{\lambda}}{d_{100}} =$$

(2) 测 (110) 面间距计算晶格常数：

表 2 (110) 晶面族衍射强度测量结果

掠射角 $\theta/^\circ$	26	27	28	29	30	31	32	33
衍射强度 I								
掠射角 $\theta/^\circ$	34	35	36	37	38	39	40	
衍射强度 I								

(110) 面 1 级衍射极大值对应的掠射角 θ ： $\theta =$

$$\text{计算晶格常数： } a = d_{110} \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} = \frac{\sqrt{2}\bar{\lambda}}{2\sin\theta} =$$

晶格常数实测值： $a =$

【注意事项】

①微波实验互相干扰较强，各组位置已经测试摆好，保证干扰最小，不要挪动。请同学关闭手机，实验过程中不要走动，任何物体甚至测量者头部的移动也会影响读数，所以实验者应适当远离发送和接收用的喇叭，以免影响接收效果。

②实验的误差来源可能是准直没有调好，使得它的对称性不好，应反复多次进行操作，找到较满意的结果。迈克尔逊干涉测量过程中移动反射板动作要慢，避免反射板晃动。

③实际操作中衍射极大处入射角出现的位置与理论计算结果对比误差较大，在调节和实验操作时，要在理论值附近几度的范围内寻找实际衍射极大角的位置。

④为了避免两喇叭之间微波直接入射（此时收到的微波信号较强），入射角的取值范围最好在 30° 到 70° 之间。

⑤简单立方晶体的模型是由穿在尼龙绳上的铝球做成的，晶格常数 $a = 4.0\text{cm}$ ，不要随意拨动小铝球的位置。

【分析和思考】

①为什么本实验（100）面只有二级极大值，不存在第三级极大值？

②本掠射角从 20° 开始测量，如果在 20° 以前测试，有时可能出现不符合布拉格公式的极大值，试解释。

【参考文献】

[1]姚启钧. 光学教程[M]. 第三版, 北京: 高等教育出版社, 2002.1

[2]陆栋, 蒋平, 徐至中. 固体物理学[M], 上海科学技术出版社, 2003.

[3] 吴思诚, 王祖铨. 近代物理实验[M], 北京: 北京大学出版社, 1999.

[4] 哈尔滨工业大学. 物理实验（近代物理及综合部分）[M], 哈尔滨工业大学出版社, 1981.10..