

第四章 光的衍射

第五节 衍射光栅

第五节 衍射光栅

5.1 多缝夫琅禾费衍射

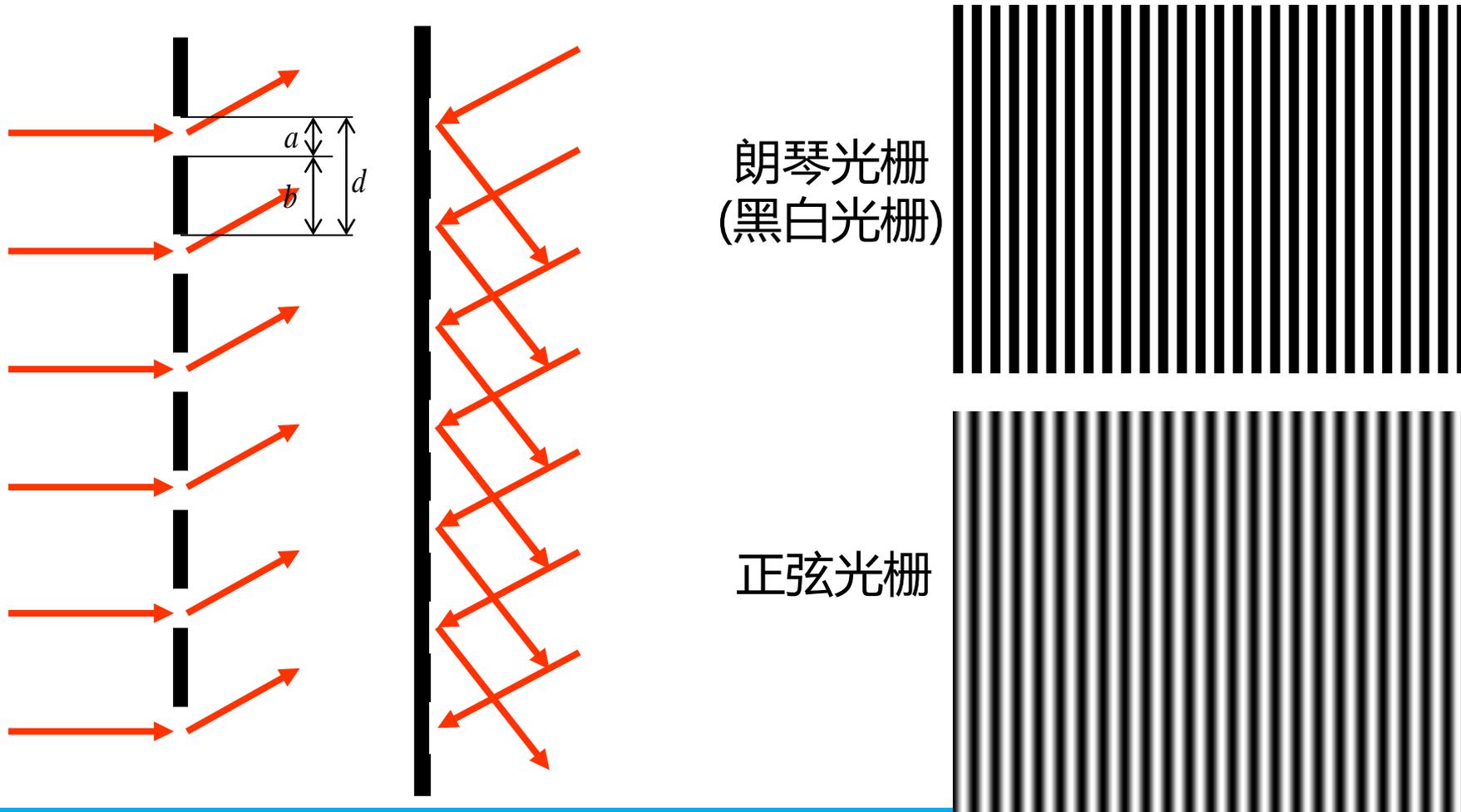
5.2 光栅光谱仪

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

5.1 多缝夫琅禾费衍射

有序结构与光栅

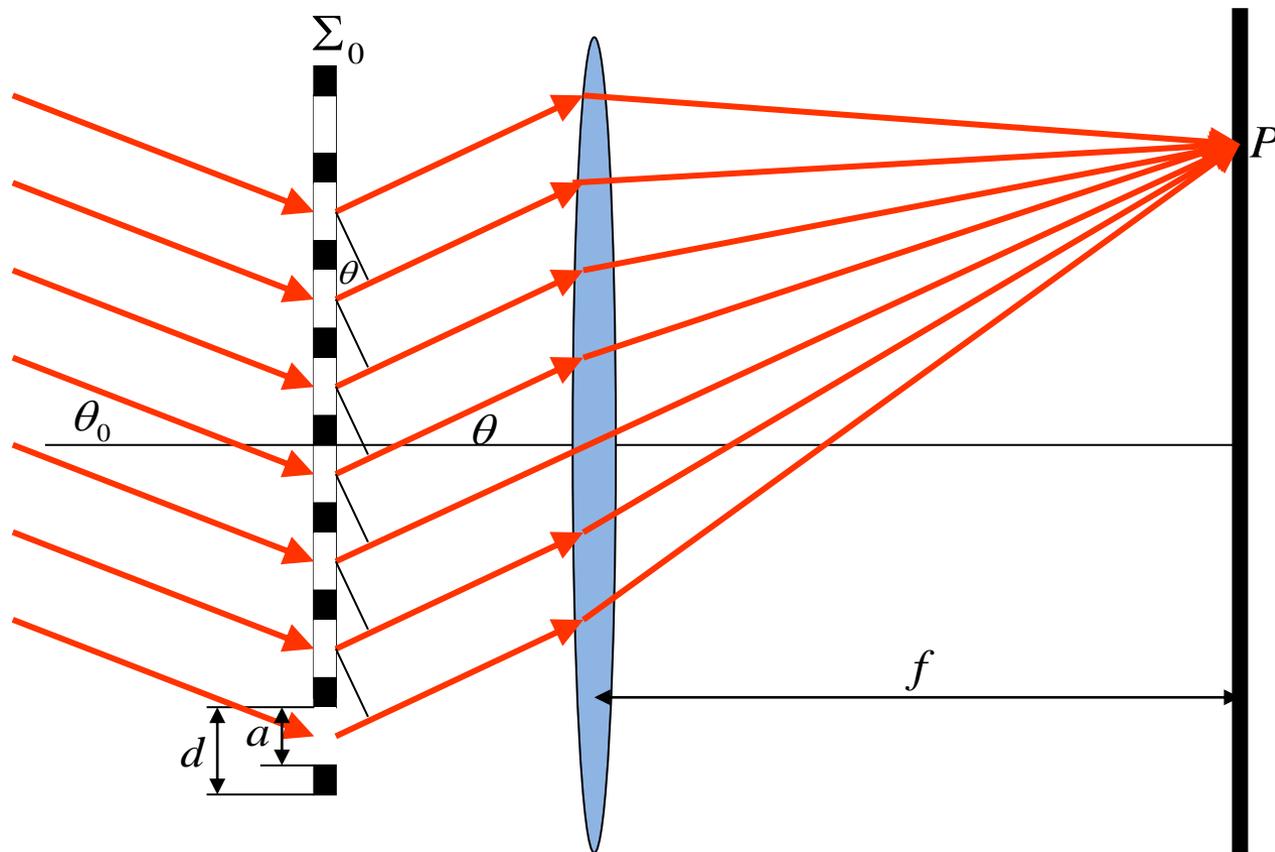
光栅：具有周期性空间结构或光学性能的衍射屏统称为光栅



5.1 多缝夫琅禾费衍射

实验装置

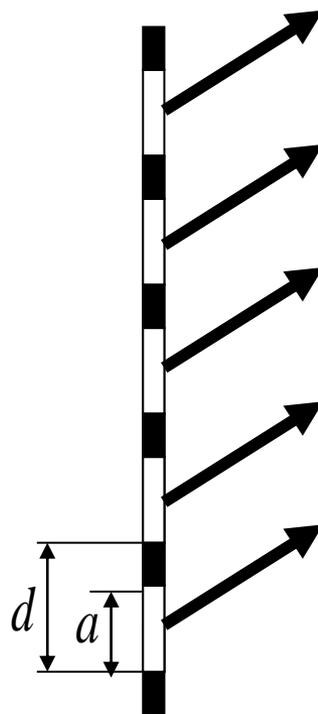
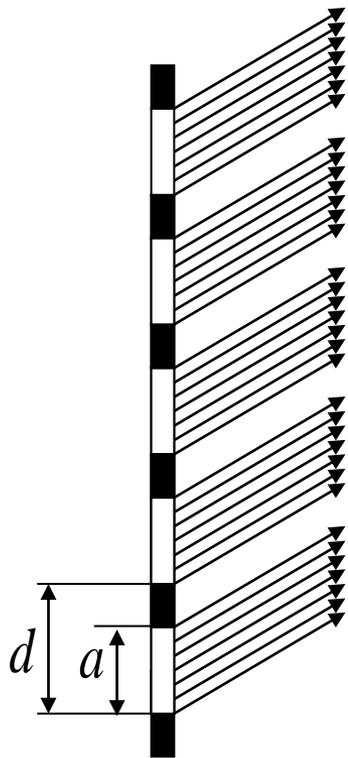
实验装置：同普通夫琅禾费衍射。



5.1 多缝夫琅禾费衍射

分析思路

- ① 经过光栅的所有光波，进行相干叠加。
- ② 光栅的每一个单元，是次波的叠加，按衍射分析；
- ③ 不同的单元之间，是分立的衍射波之间的叠加，按干涉分析。



5.1 多缝夫琅禾费衍射

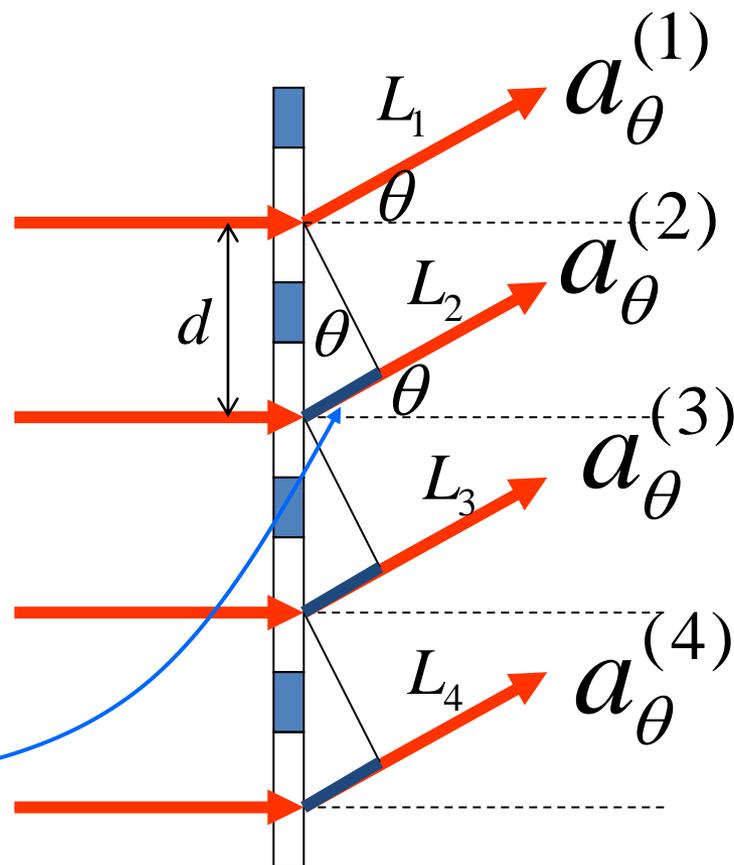
N缝衍射的振幅和强度分布

- ① 每一个单元衍射的复振幅用一个矢量表示。
- ② 相邻的单元衍射之间具有相位差 $\Delta\varphi$ 。
- ③ 所有单元衍射的矢量和为光栅衍射的复振幅。

各个单元衍射矢量的光程为

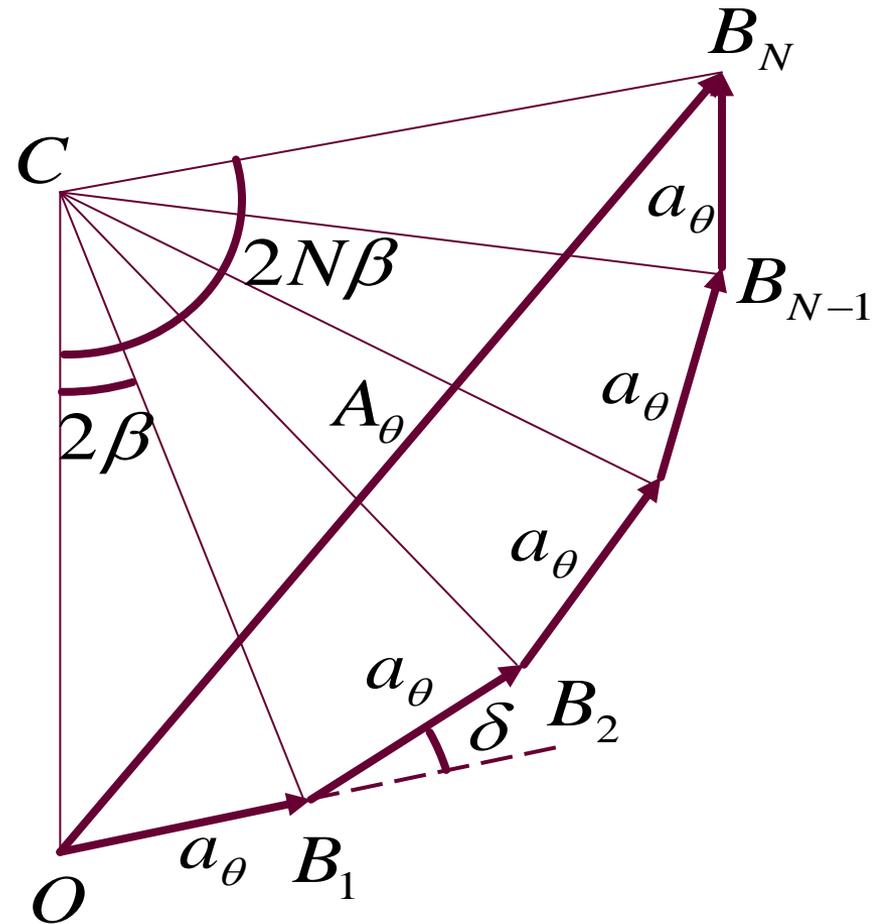
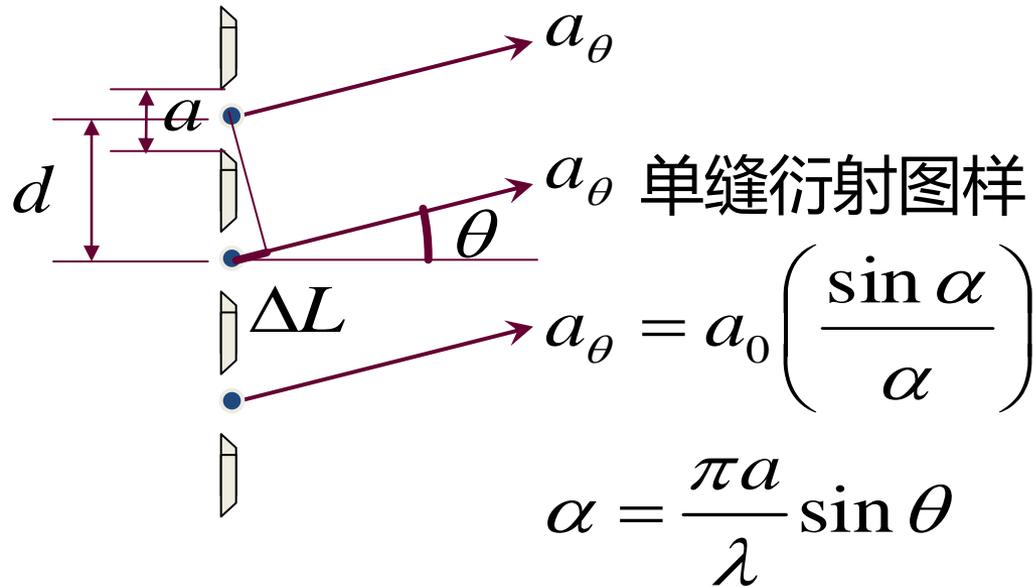
$$L_2 = L_1 + \underline{d \sin \theta}$$

$$L_n = L_1 + (n-1)d \sin \theta$$



5.1 多缝夫琅禾费衍射

N缝衍射的振幅和强度分布



缝间 (相邻衍射单元) 光程差 :

$$\Delta L = d \sin \theta$$

缝间 (相邻衍射单元) 位相差 : $\delta = 2\beta = k\Delta L = \frac{2\pi d}{\lambda} \sin \theta$

5.1 多缝夫琅禾费衍射

缝间干涉因子的特点

(1) 主极大：

① 位置

$$\beta = j\pi \Rightarrow \sin \theta = j \frac{\lambda}{d} \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n$$

② 数目

$$j_{\max} = [d/\lambda] \quad (\sin \theta < 1)$$

③ 强度

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

单缝的 N^2 倍

说明：主极大的强度与 N 有关，位置与 N 无关

5.1 多缝夫琅禾费衍射

缝间干涉因子的特点

(2) 零点和次级大：

干涉因子极小值 $\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} = 0 \Rightarrow N\beta = m\pi \quad \beta \neq n\pi$

$$\sin \theta = m\lambda / Nd, \quad \sin \theta \neq n\lambda / d$$

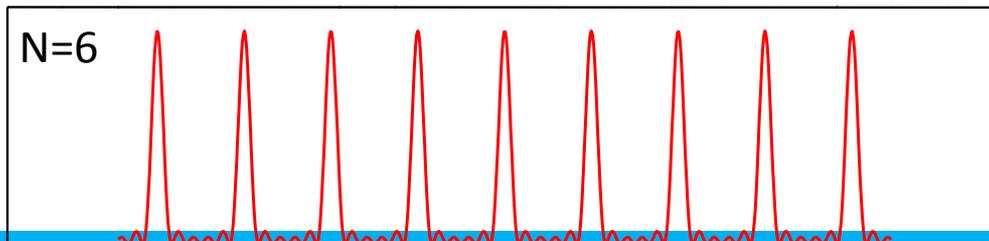
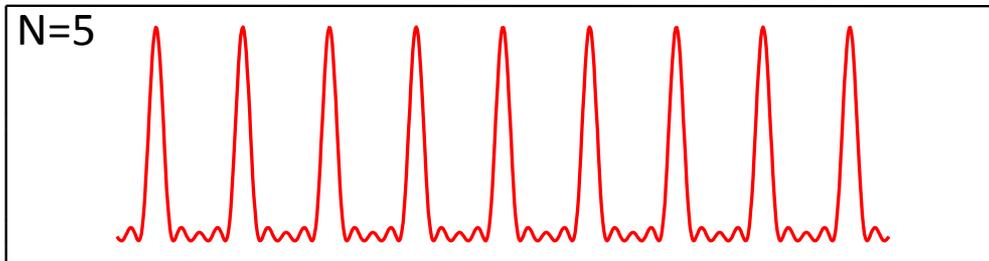
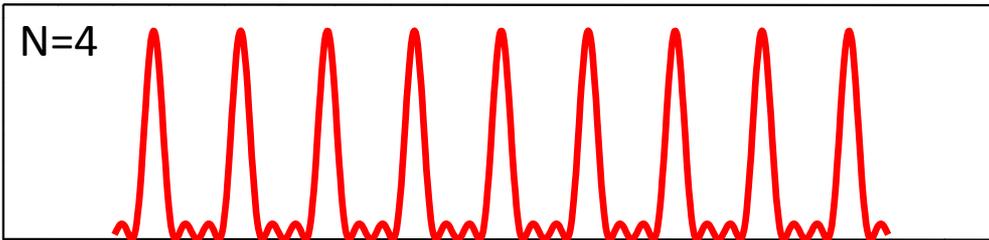
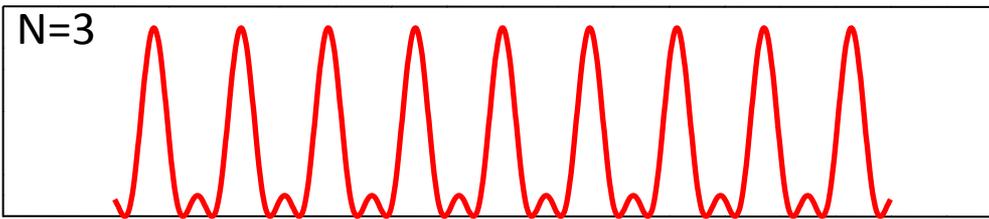
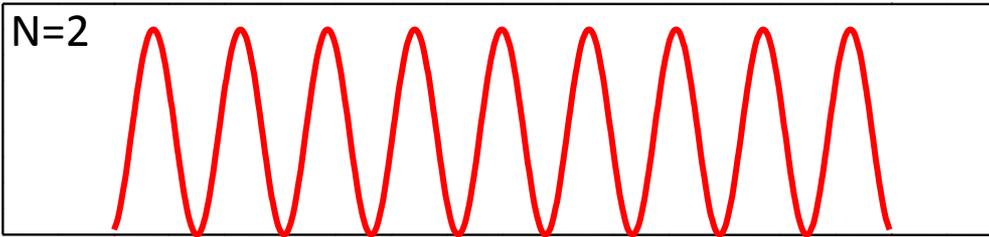
$$\sin \theta = [0], \lambda / Nd, \dots, (N-1)\lambda / Nd, [\lambda / d],$$

$$(N+1)\lambda / Nd, (N+2)\lambda / Nd, \dots, (2N-1)\lambda / Nd, [2\lambda / d], \dots$$

零点：

$$\begin{array}{l} \text{位置} \\ \text{个数} : N-1 \end{array} \sin \theta = \left(j + \frac{m}{N} \right) \frac{\lambda}{d} \quad \begin{cases} j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n \\ m = 1, 2, \dots, N-1 \end{cases}$$

次极大：每两个相邻暗线之间存在一个次级大，共 $N-2$ 个。



5.1 多缝夫琅禾费衍射

缝间干涉因子的特点

(3) 半角宽度

主极大的半角宽：中心到邻近暗线间的角距离，也就是极大值到相邻极小值的角距离。

极大值

$$d \sin \theta = j\lambda$$

相邻极小值

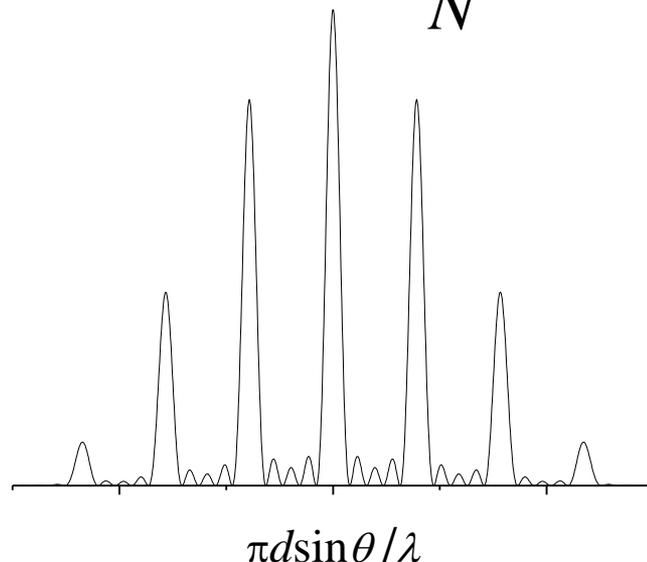
$$d \sin(\theta \pm \Delta\theta) = j\lambda \pm \frac{1}{N}\lambda$$

相减

$$d \cos \theta \Delta\theta = \frac{1}{N}\lambda$$

$$\Delta\theta = \frac{\lambda}{Nd \cos \theta} = \frac{\lambda}{L \cos \theta}$$

$L = Nd$ 光栅的有效宽度



5.1 多缝夫琅禾费衍射

单缝衍射因子的作用

(1) 极大值的强度被调制。

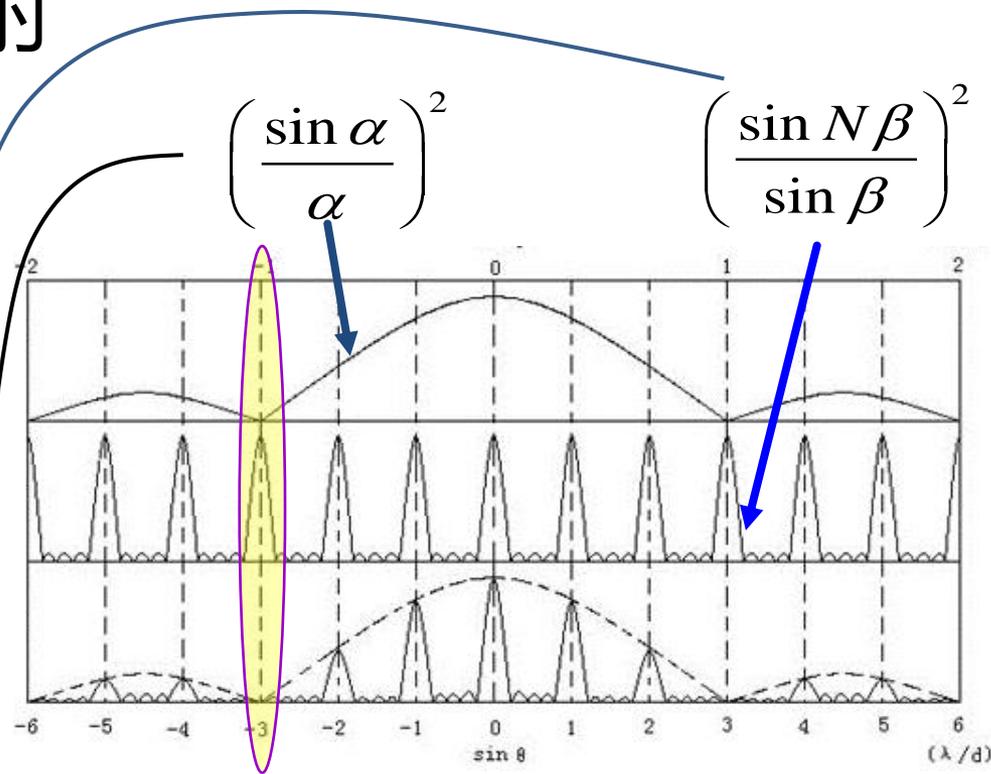
(2) 缺级。

干涉极大位置

$$\sin\theta_1 = j\lambda/d$$

衍射极小位置

$$\sin\theta_2 = j'\lambda/a$$



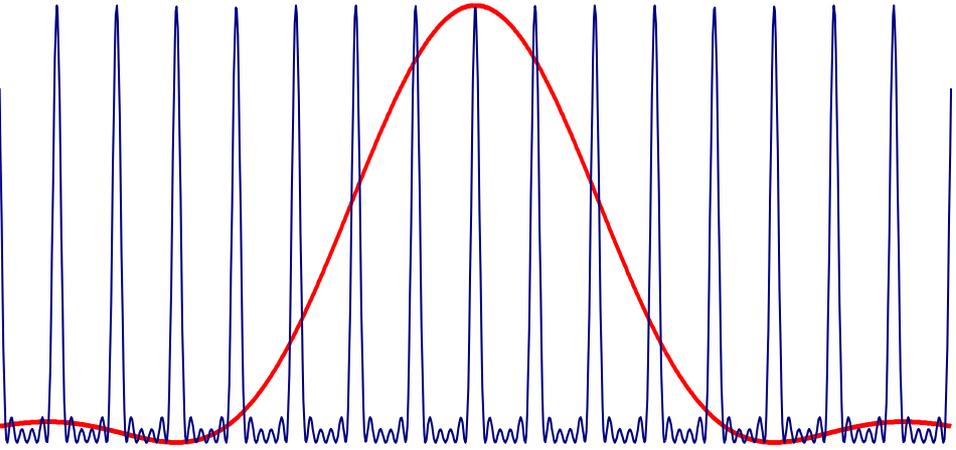
当干涉的最大值与衍射的极小值重合时，出现缺级。

$$\theta_1 = \theta_2 \Rightarrow j \frac{\lambda}{d} = j' \frac{\lambda}{a} \Rightarrow \frac{j}{j'} = \frac{d}{a}$$

5.1 多缝夫琅禾费衍射

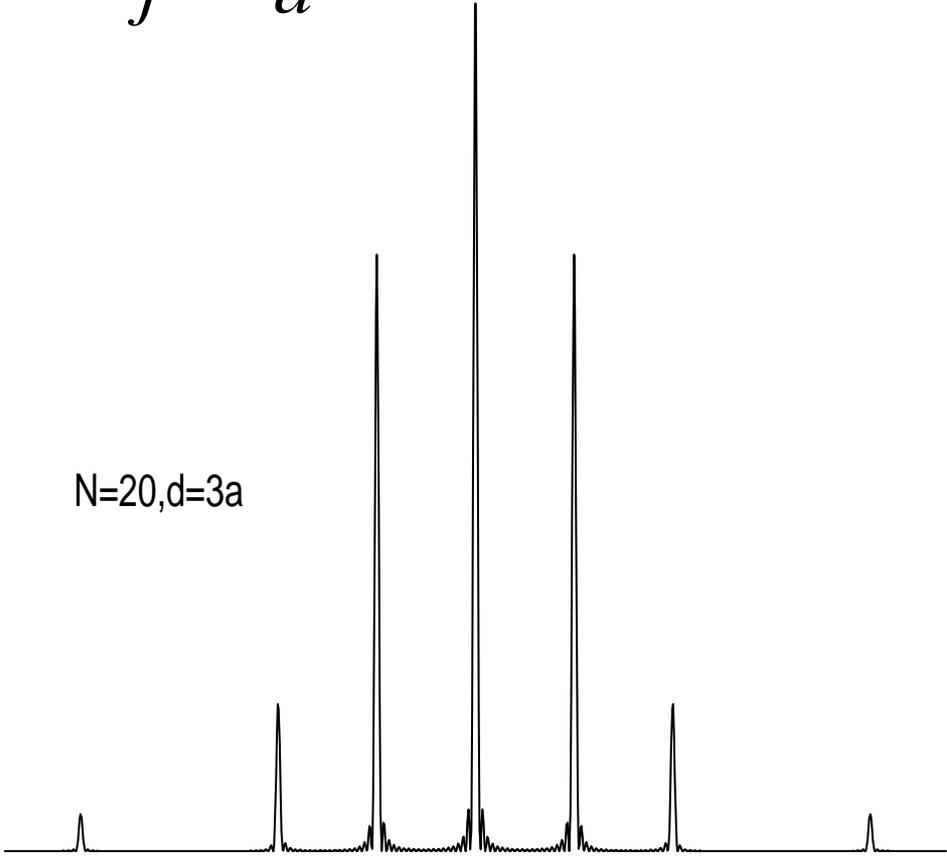
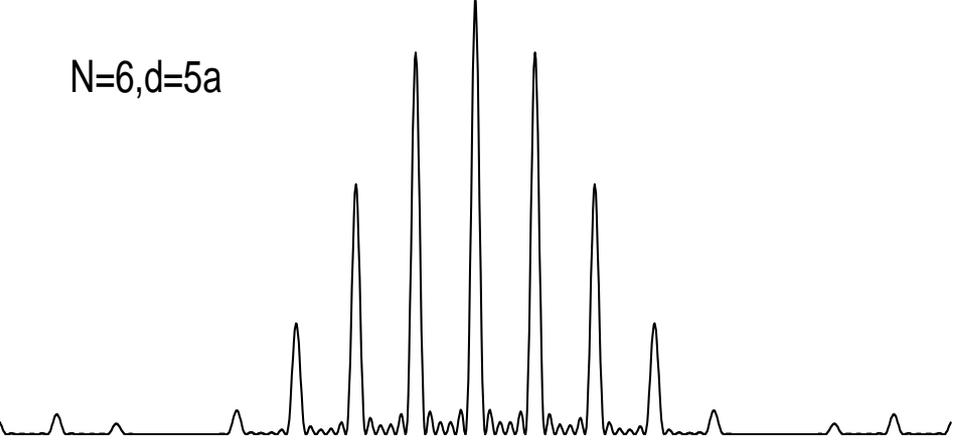
单缝衍射因子的作用

$$\frac{j}{j'} = \frac{d}{a}$$



N=6, d=5a

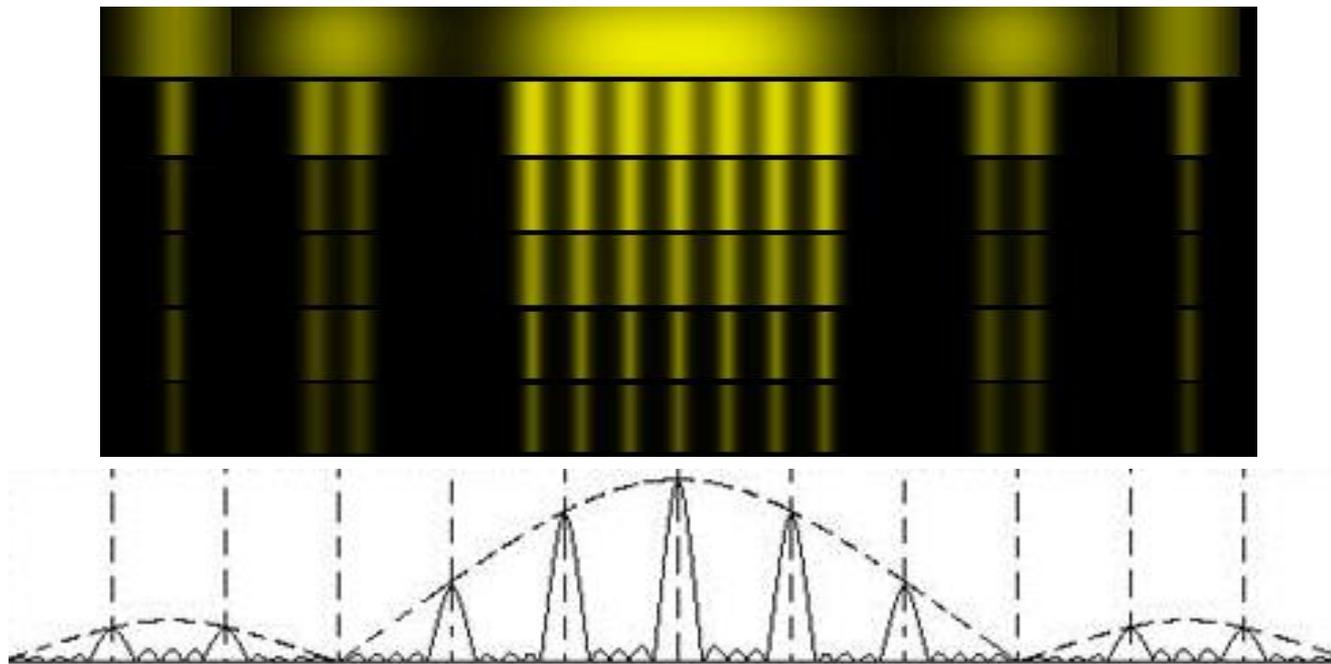
N=20, d=3a



5.1 多缝夫琅禾费衍射

多缝夫琅禾费衍射图样的特点总结

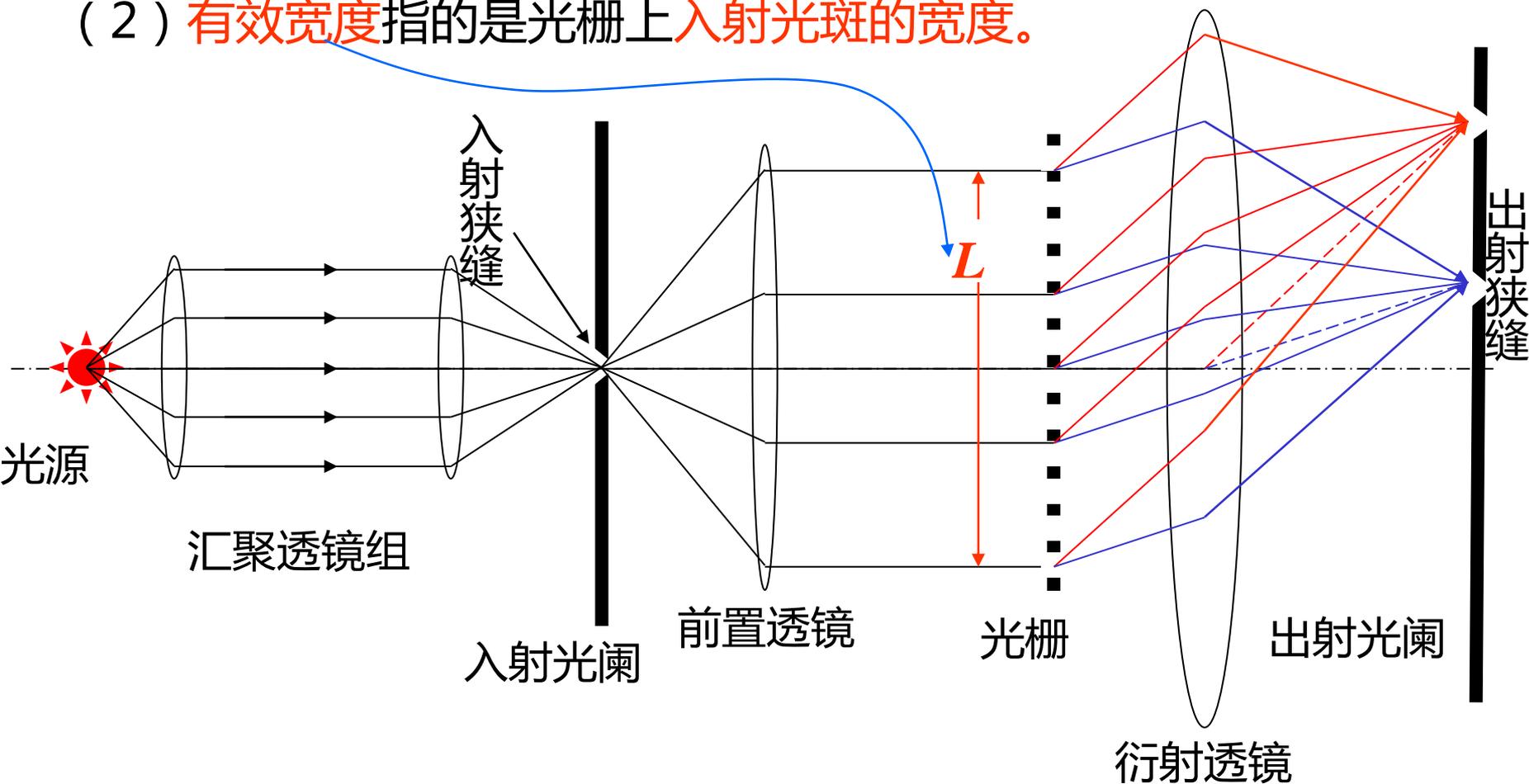
- ① 存在主极强与次极强；
- ② 主极强的位置与缝数 N 无关，宽度随 N 减小，强度与 N^2 成正比；
- ③ 相邻主极强间有 $N-1$ 条暗纹和 $N-2$ 条次极强。
- ④ 会出现缺级。



5.1 多缝夫琅禾费衍射

光栅的有效宽度

- (1) 平行光射向光栅，被入射光覆盖的部分才能起到衍射的作用。
- (2) 有效宽度指的是光栅上入射光斑的宽度。



5.1 多缝夫琅禾费衍射

用积分法进行复振幅的计算

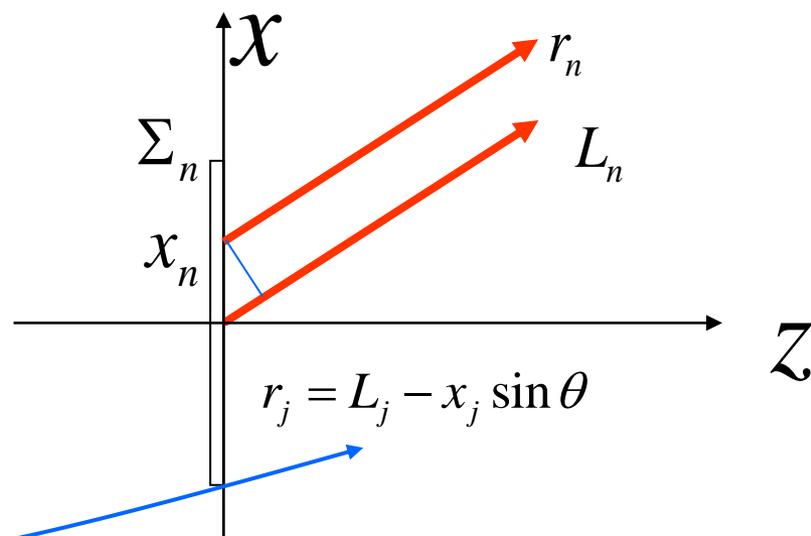
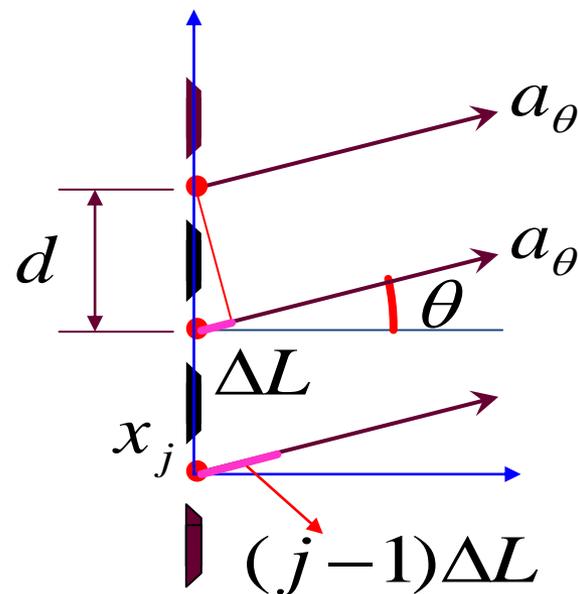
光程差： $L_j = L_1 + (j-1)\Delta L$

其中 $\Delta L = d \sin \theta$

满足近轴条件下，先对每一狭缝求衍射积分，再将各个缝的衍射积分相加。即先处理每个单元的衍射，再处理所有单元间的干涉。

菲涅耳—基尔霍夫衍射公式

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\theta) &= C \int_{(\Sigma)} \tilde{U}_0(x) e^{ikr} dx \\ &= \sum_{j=1}^N C \int_{(\Sigma_j)} \tilde{U}_0(x_j) e^{ikr_j} dx_j \end{aligned}$$



5.1 多缝夫琅禾费衍射

用积分法进行复振幅的计算

$$\begin{aligned} \int_{(\Sigma_j)} \tilde{U}_0(x_j) e^{ikr_j} dx_j &= e^{ikL_j} \int_{(\Sigma_j)} \tilde{U}_0(x_j) e^{-ikx_j \sin \theta} dx_j \\ &= e^{ikL_j} \int_{-d/2}^{d/2} \tilde{U}_0(x) e^{-ikx \sin \theta} dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\theta) &= C \left(\sum_{j=1}^N e^{ikL_j} \right) \int_{-d/2}^{d/2} \tilde{U}_0(x) e^{-ikx \sin \theta} dx \\ &= \tilde{N}(\theta) \tilde{u}(\theta) \end{aligned}$$

$$\tilde{N}(\theta) = C \left(\sum_{j=1}^N e^{ikL_j} \right) \quad \tilde{u}(\theta) = \int_{-d/2}^{d/2} \tilde{U}_0(x) e^{-ikx \sin \theta} dx$$

5.1 多缝夫琅禾费衍射

用积分法进行复振幅的计算

N 元干涉因子：

仍使用 $\beta = \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta$ 则 $\Delta L = d \sin \theta \Rightarrow k\Delta L = 2\beta$

$$\begin{aligned} \tilde{N}(\theta) &= e^{ikL_1} \left(1 + e^{2i\beta} + e^{4i\beta} + \dots + e^{2(N-1)i\beta} \right) = e^{ikL_1} \frac{1 - e^{2iN\beta}}{1 - e^{2i\beta}} \\ &= e^{ikL_1} \frac{e^{iN\beta}}{e^{i\beta}} \frac{e^{-iN\beta} - e^{iN\beta}}{e^{-i\beta} - e^{i\beta}} = e^{ikL_1} e^{i(N-1)\beta} \frac{e^{-iN\beta} - e^{iN\beta}}{e^{-i\beta} - e^{i\beta}} \\ &= e^{i\varphi} N(\theta) \end{aligned}$$

$$\varphi = kL_1 + (N-1)\beta \Rightarrow \varphi(\theta) = kL_0(\theta)$$

$$N(\theta) = \frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \quad \text{只依赖于 } N \text{ 单元的空间排列}$$

5.1 多缝夫琅禾费衍射

黑白光栅和正弦光栅

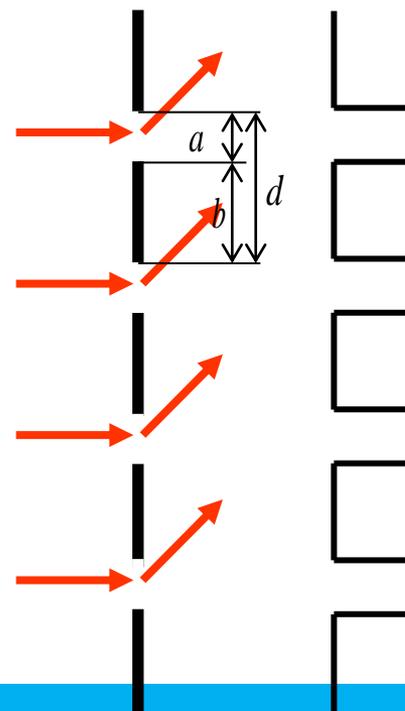
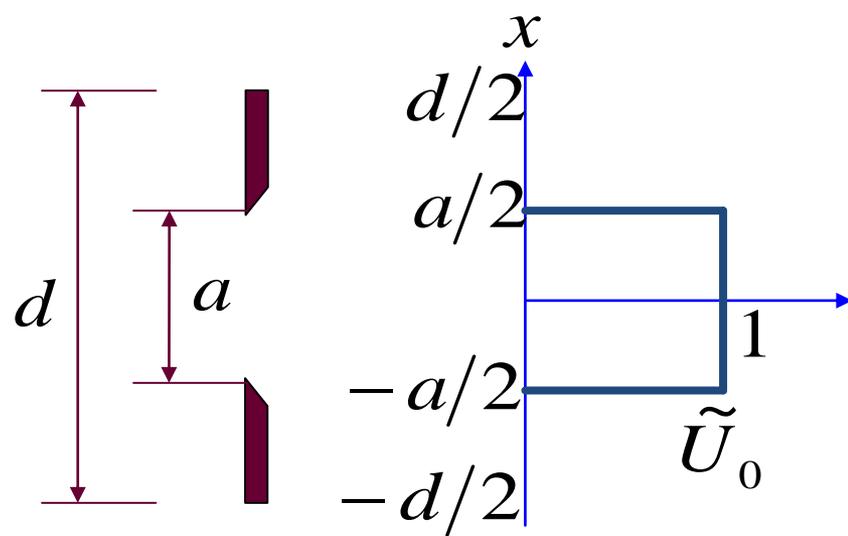
黑白光栅单元因子

$$\begin{aligned}\tilde{u}(\theta) &\propto \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx \sin \theta} dx \\ &= \frac{1}{ik \sin \theta} (e^{ika \sin \theta/2} - e^{-ika \sin \theta/2}) \\ &\propto \frac{\sin \alpha}{\alpha}\end{aligned}$$

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

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

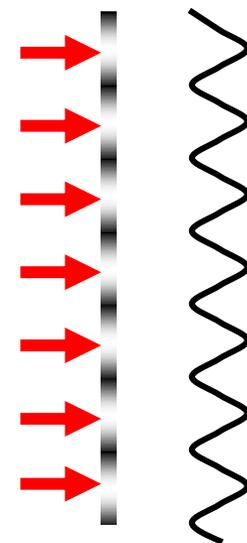
I_0 是满足近轴条件时，单个狭缝在像方焦点处的光强

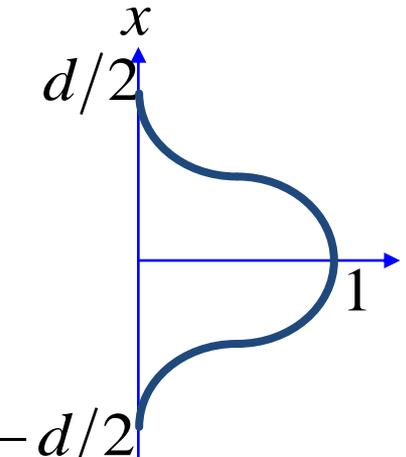


5.1 多缝夫琅禾费衍射

黑白光栅和正弦光栅

正弦光栅单元因子





$$\begin{aligned}
 \tilde{u}(\theta) &\propto \int_{-d/2}^{d/2} \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{d} \right) e^{-ikx \sin \theta} dx \\
 &= \int_{-d/2}^{d/2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{i2\pi x/d} + \frac{1}{2} e^{-i2\pi x/d} \right) e^{-ikx \sin \theta} dx \\
 &\propto \frac{\sin \beta}{\beta} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta - \pi)}{\beta - \pi} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta + \pi)}{\beta + \pi}
 \end{aligned}$$

有三个极大, $\beta = 0, \pm \pi$, 分别与干涉因子的 $0, \pm 1$ 级极大重合, 而 $\tilde{N}(\theta)$ 的其它极大都与 $\tilde{u}(\theta)$ 的零点重合, 故衍射中只有三个峰, 其中 ± 1 的振幅为 0 级的一半。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

复振幅的计算 黑白光栅和正弦光栅

正弦光栅的特点

由于 $a = d$, 所以 $\alpha = \beta$

$$I(\theta) = I_0 \left[\frac{\sin \beta}{\beta} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta - \pi)}{\beta - \pi} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta + \pi)}{\beta + \pi} \right]^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$

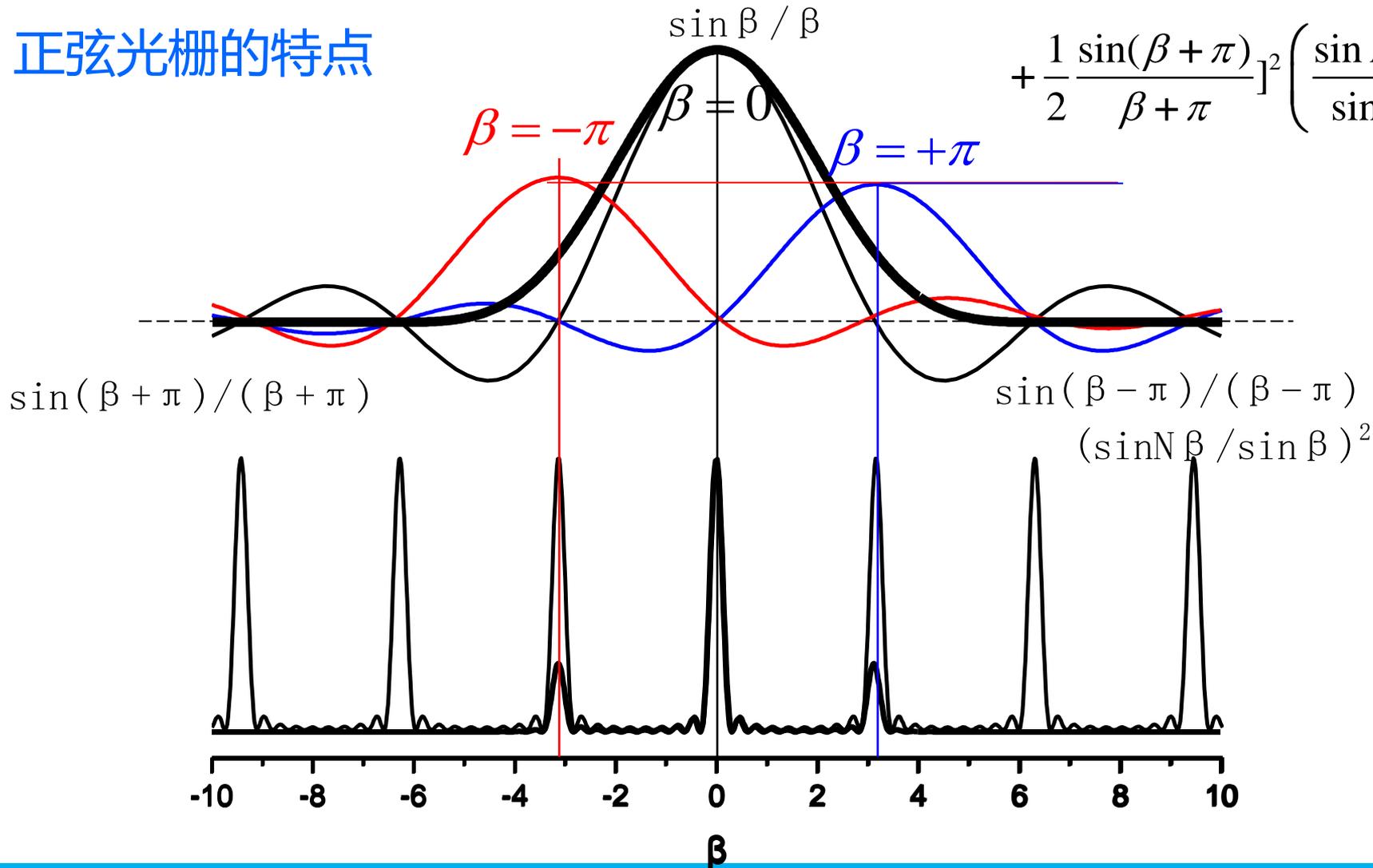
- ① 相当于具有三个单元衍射因子, 缝宽为 d 。
- ② 狭缝衍射的几何成像方向分别沿 $\beta=0$ 、 π 、 $-\pi$ 的方向。
- ③ 上述方向正是缝间 N 元干涉因子的 0 级和 ± 1 级的方向。
- ④ 其余的级次全部抵消。所以只有这三级衍射。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

复振幅的计算 黑白光栅和正弦光栅

正弦光栅的特点

$$I(\theta) = I_0 \left[\frac{\sin \beta}{\beta} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta - \pi)}{\beta - \pi} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta + \pi)}{\beta + \pi} \right]^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2$$



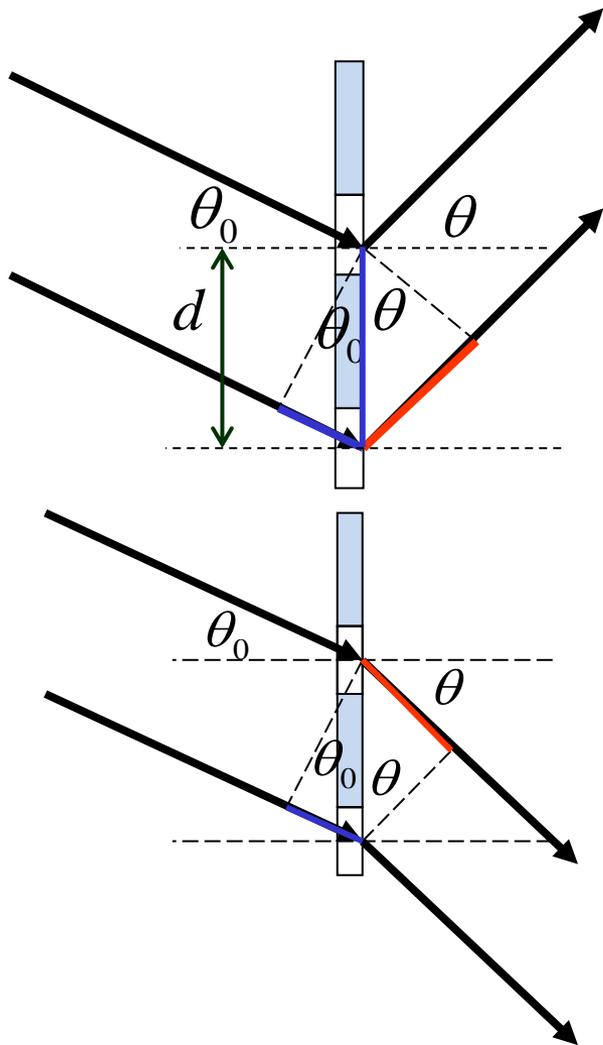
5.1 多缝夫琅禾费衍射

光栅方程

- ① 光栅光谱由 N 元干涉因子，即缝间干涉因子决定。
 $\beta = \pi d \sin \theta / \lambda = j\pi$ 对应 j 级光谱。
- ② 相邻单元间的相位差 $\Delta\varphi = kd \sin \theta = 2j\pi$ ，光程差 $\Delta = d \sin \theta = j\lambda$ 决定了光谱线的位置。
 $d \sin \theta = j\lambda$ 被称为光栅方程。
- ③ 平行光正入射时，各个干涉主极大值的位置由方程 $\sin \theta = j\lambda / d$ ，即 $d \sin \theta = j\lambda$ 确定。
- ④ 如果入射光与光栅不垂直，则必须计算入射光的光程差。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

对光栅方程的进一步理解—正负号的取法



对于**透射**，相邻单元间总的光程差

$$\Delta = d(\sin \theta \pm \sin \theta_0)$$

N 元干涉因子取得主极大的条件

$$\Delta = d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = j\lambda$$

$$j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

光栅方程为

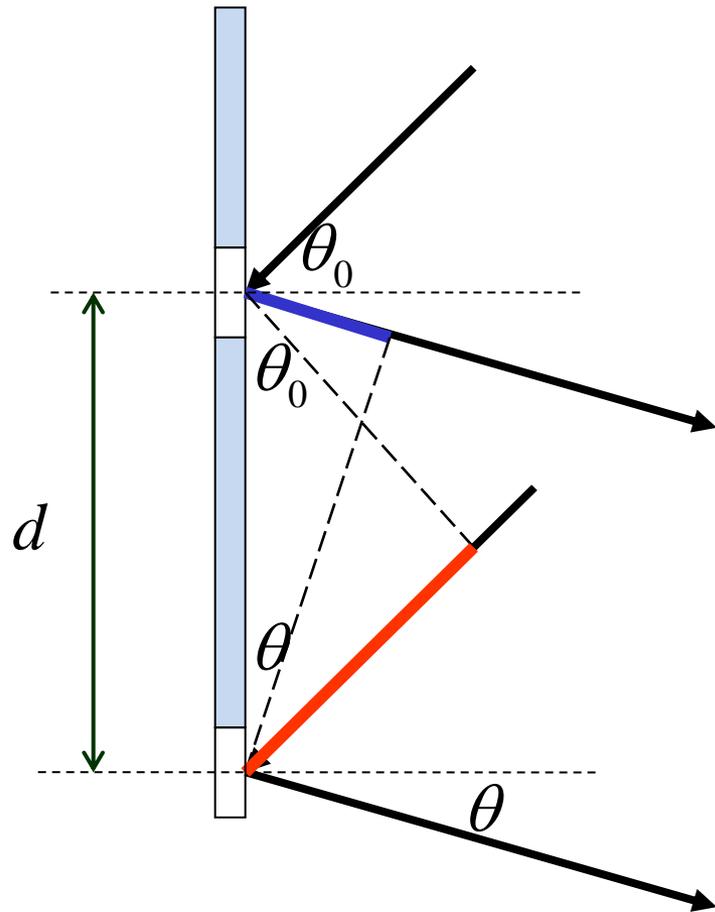
$$d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = k\lambda$$

入射光与衍射光在光栅法线**同侧**，取+；

入射光与衍射光在光栅法线**异侧**，取-。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

对光栅方程的进一步理解—正负号的取法



对于**反射**，相邻单元总的光程差

$$\Delta = d(\sin \theta \pm \sin \theta_0)$$

光栅方程为

$$d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = k\lambda$$

符号法则与透射光栅相同

入射光与衍射光在光栅法线**同侧**，取+；

入射光与衍射光在光栅法线**异侧**，取-。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

双缝衍射和杨氏干涉的比较

双缝衍射

$$I(\theta) = 4I_0 \frac{\sin^2 \alpha}{\alpha^2} \frac{\sin^2 2\beta}{\beta^2} = 4I_0 \frac{\sin^2 \alpha}{\alpha^2} \cos^2 \beta$$

杨氏干涉

$$\begin{aligned} I &= 2I_0 [1 + \cos(\Delta\varphi)] = 2I_0 [1 + \cos(\frac{2\pi d}{\lambda} \sin \theta)] \\ &= 2I_0 (1 + \cos 2\beta) = 4I_0 \cos^2 \beta \end{aligned}$$

当 $a \ll \lambda$ 时, $\alpha = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta \approx 0 \Rightarrow \frac{\sin \alpha}{\alpha} = 1$ 两者相等

杨氏干涉中, 狭缝足够细, 每一缝只有一个次波中心。此时没有单元衍射。

思考：我们一般实验中看到的杨氏双缝干涉图样是真正意义上的干涉图样, 还是双缝衍射图样? 请加以讨论。

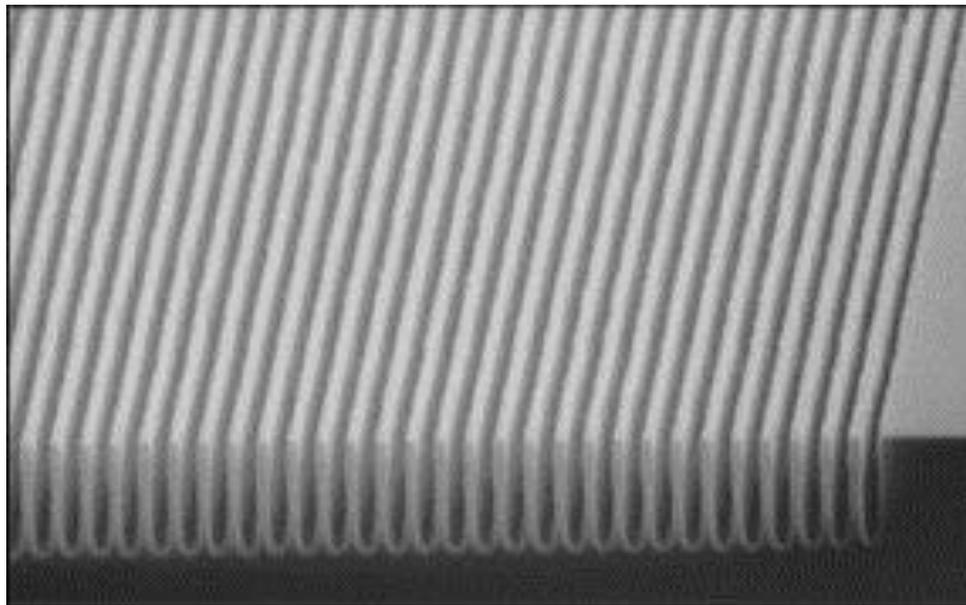
5.1 多缝夫琅禾费衍射

干涉和衍射的区别和联系总结

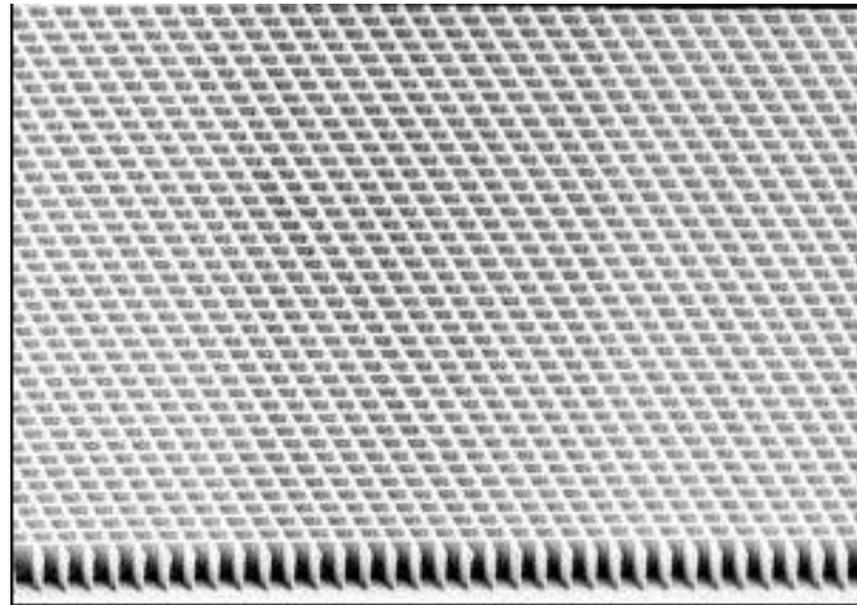
- ① 都是光的波动性质的具体表现；
- ② 干涉指的是光波被分割成有限几束或彼此分离的无限多束，其中每束可以近似地用几何光学规律描述；
- ③ 衍射指的是需将光波波前分割成无限多个连续的次波源，其中每个次波源并不服从几何光学规律；
- ④ 干涉理论运算时，矢量图解是个折线，复振幅的迭加是个级数；而衍射理论运算时，矢量图解是光滑曲线，复振幅迭加需用积分；
- ⑤ 实际上的干涉效应总是和衍射效应同时存在的，条纹要受单元衍射因子的调制。

5.1 多缝夫琅禾费衍射

实际光栅的细节



硅片上离子束刻蚀的光栅
(周期：440nm)



正交光栅 (周期：500nm)

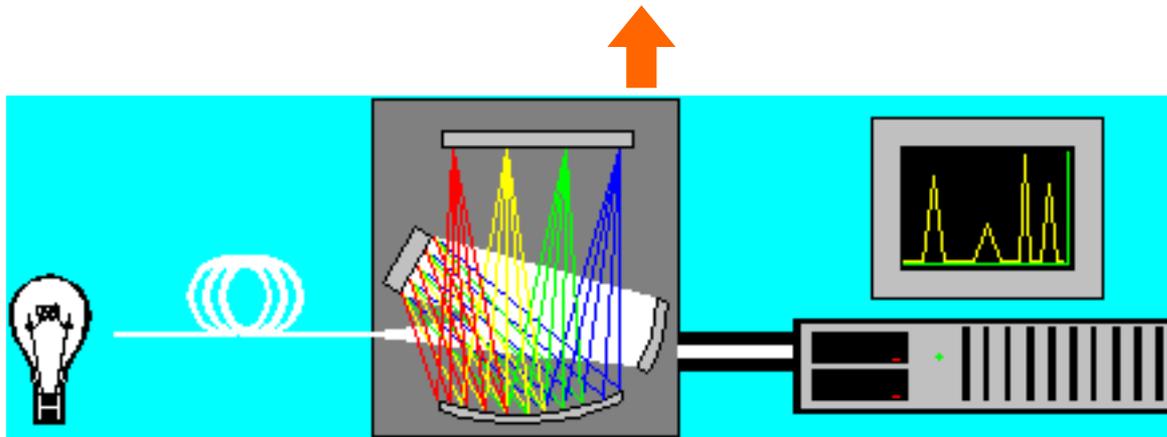
第五节 衍射光栅

5.1 多缝夫琅禾费衍射

5.2 光栅光谱仪

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

物理、化学、生命、材料、....., 工业、农业、军事、.....



1.光源

2.照明准直

3.分光

4.成像

5.接收

- 1. 原子发光和吸收
- 2. 分子吸收
- 3. 喇曼散射
- 4. 荧光
- 5. 激光
- 6. 氙灯 钨灯

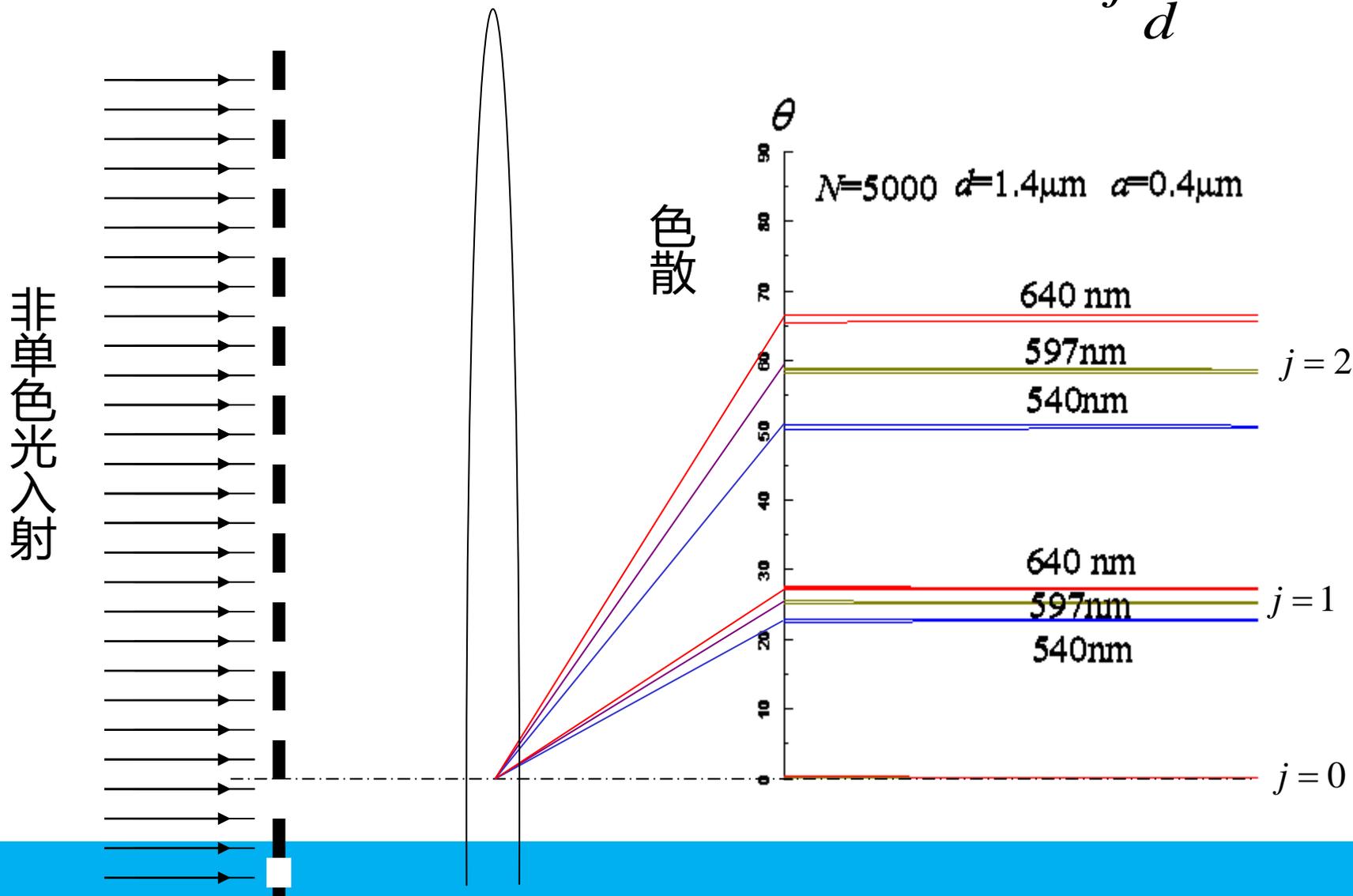
- 1. 物质 (棱镜)
- 2. 衍射 (光栅)
- 3. 干涉 (F-P)
- 4. 干涉 (傅里叶)

- 1. 直读
- 2. 照相
- 3. 光电
- 4. CCD
- 5. CMOS

5.2 光栅光谱仪

光栅的分光原理

$$\sin \theta = j \frac{\lambda}{d}$$



5.2 光栅光谱仪

光栅的分光原理

$\theta = \theta(\lambda)$ 不同波长的光在空间分开称为**色散**，光栅具有色散能力。

$$\sin \theta = j \frac{\lambda}{d}$$

两端取微分

光栅公式： $d \sin \theta = j\lambda \quad \Rightarrow \quad d \cos \theta \delta\theta = j\delta\lambda$

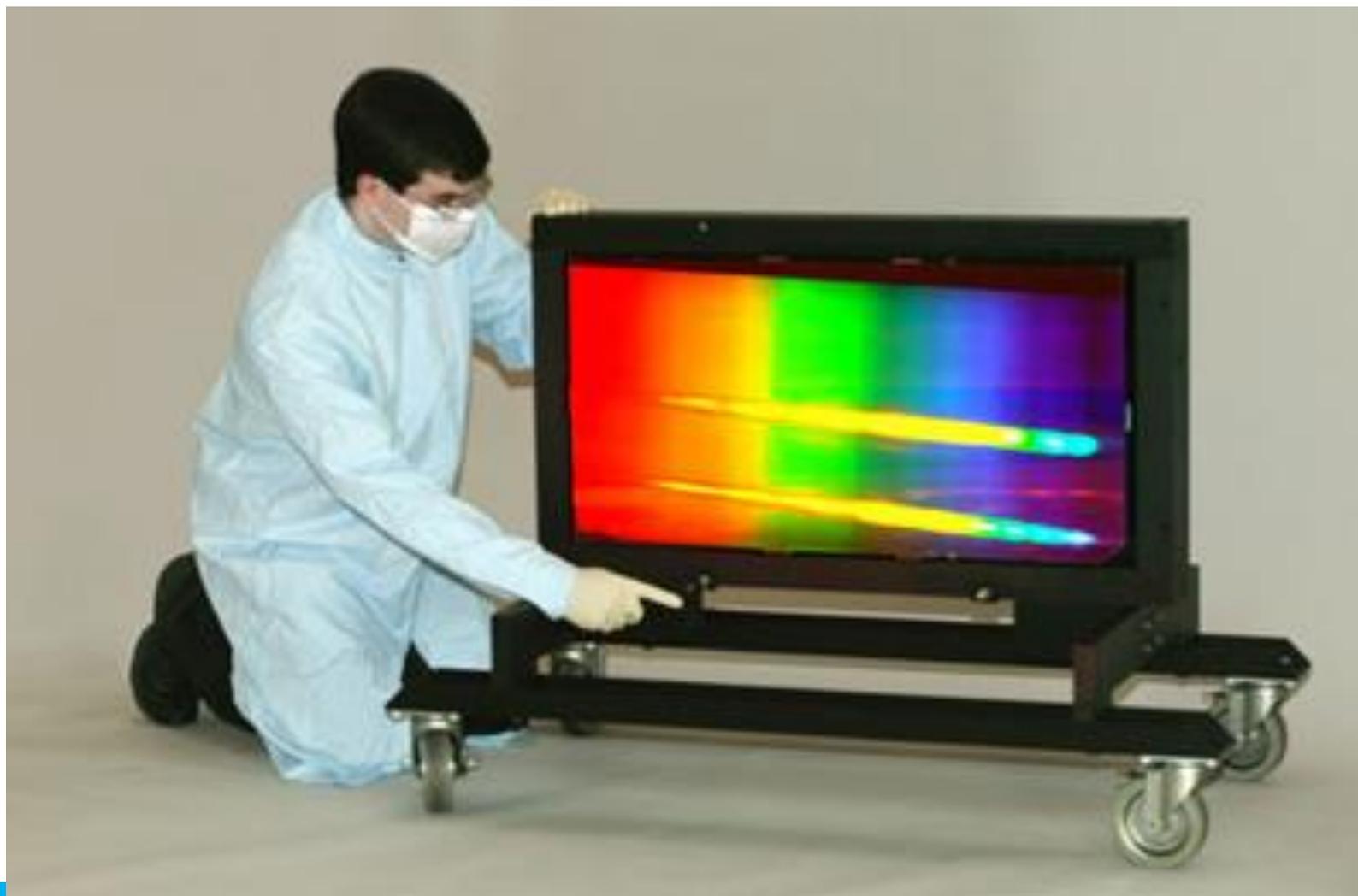
区别于棱镜光谱仪的是光栅光谱仪有多套光谱，分别对应于光栅的不同衍射级次，而棱镜光谱仪只有一套。

光谱仪的参数

1. 分开不同波长的光：色散本领、色分辨本领
2. 自由光谱范围
3. 记录不同波长的光的强度：强度分辨本领
4. 时间分辨本领
5. 效率
6. 价格

5.2 光栅光谱仪

光栅的分光效果



5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪的关键指标

(1) 角色散本领 (角色散率)

$$d \cos \theta \delta \theta = j \delta \lambda$$

$$D_{\theta} \equiv \frac{\delta \theta}{\delta \lambda} = \frac{j}{d \cos \theta_j}$$

$$j = 0, \quad \delta \theta / \delta \lambda = 0$$

零级光谱无色散，原因是其光程差等于零。

(2) 线色散本领 (线色散率)

$$D_l \equiv \frac{\delta l}{\delta \lambda} \approx \frac{f \delta \theta}{\delta \lambda} = \frac{jf}{d \cos \theta_j} \quad D_l \approx f D_{\theta}$$

色散本领指的是中心位置分离的程度，不反映谱线是否重叠！
与光栅常数 d 、级数 j 、焦距 f 有关。与 N 无关。

5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪的关键指标

(3) 色分辨本领

反应谱线的重叠程度，即可分辨出是两条谱线的极限。

$$\Delta\theta = \frac{\lambda}{Nd \cos\theta}$$

其中 N 为缝数。



① 瑞利判据：角间隔等于半角宽度。 $\delta\theta = \Delta\theta$

② 最小分辨波长： $\delta\lambda = \frac{\delta\theta}{D_\theta} = \frac{\Delta\theta}{D_\theta} = \frac{d \cos\theta}{j} \cdot \frac{\lambda}{Nd \cos\theta} = \frac{\lambda}{jN}$

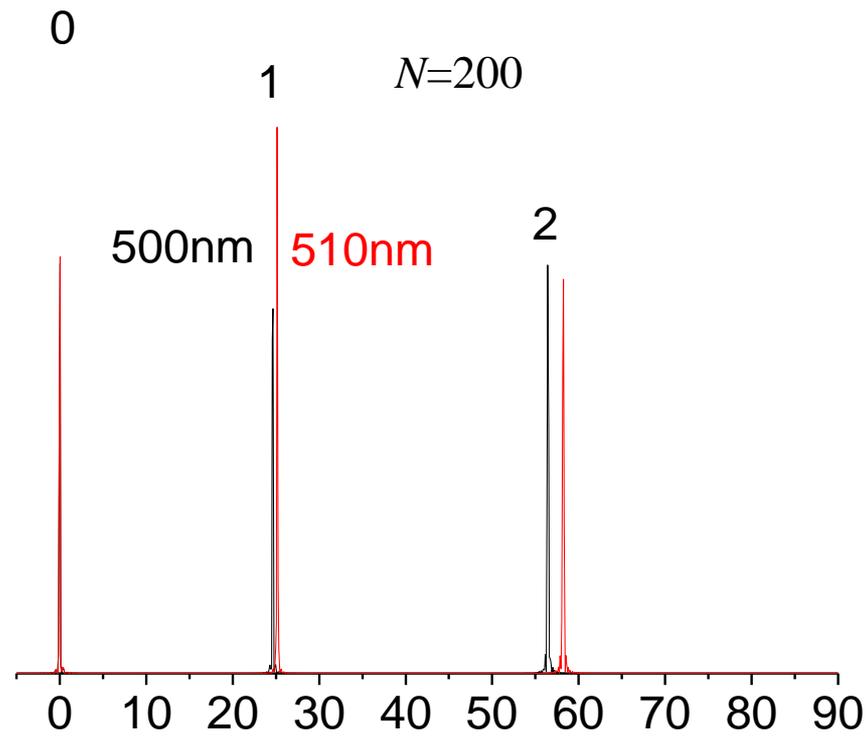
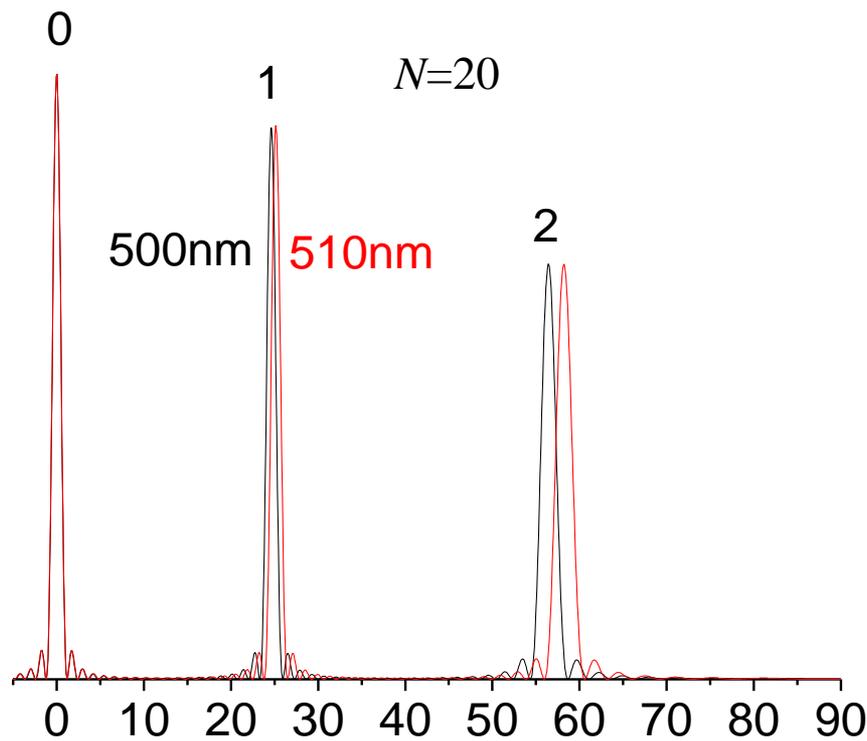
③ 分辨本领： $R \equiv \frac{\lambda}{\delta\lambda} = jN$

色分辨本领和峰宽关联！正比于衍射单元总数 N 和光谱级数 j ，与光栅常数 d 无关。

色散本领和色分辨本领都是为了量化说明最终可以被接收装置分辨的最小波长间隔 $\delta\lambda$ 。

5.2 光栅光谱仪

光栅的色散本领和色分辨本领实例



$$\Delta\theta = \frac{\lambda}{Nd \cos\theta} = \frac{\lambda}{L \cos\theta}$$

$$\delta\theta = j \frac{\delta\lambda}{d \cos\theta}$$

5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪的关键指标

(4) 光栅的量程

同时必须满足光栅对量程的要求

$$d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = j\lambda \quad \sin \theta \pm \sin \theta_0 \leq 2$$

$\lambda \leq 2d / j$ 通常平行光入射, 则 $\lambda \leq d / j$ 一级光谱 $\lambda \leq d$

$\lambda_M = d$ 即光栅的量程。

(5) 自由光谱范围

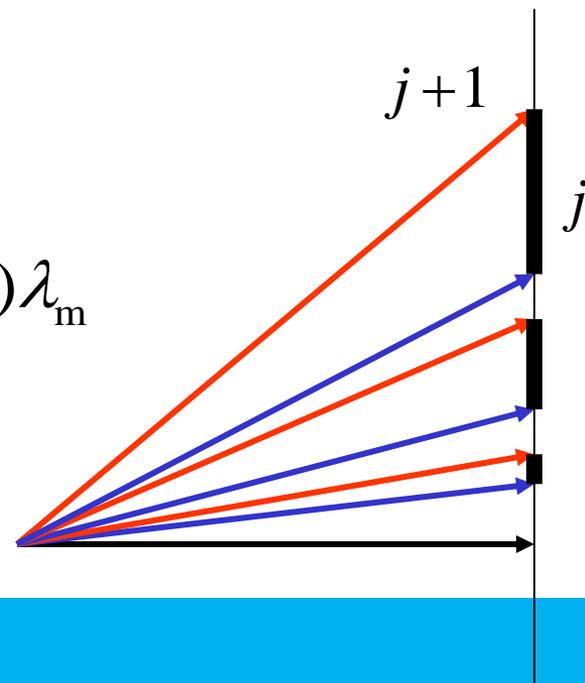
$$\lambda_m \sim \lambda_M = \lambda_m + \Delta\lambda$$

j 级光谱不重叠的条件是 $j(\lambda_m + \Delta\lambda) < (j+1)\lambda_m$

$$\Delta\lambda < \lambda_m / j \quad \text{即} \quad \lambda_M - \lambda_m < \lambda_m / j$$

对于1级光谱 $\lambda_M - \lambda_m < \lambda_m$ $\lambda_m > \lambda_M / 2$

不会重叠的光谱范围, 即自由光谱范围。

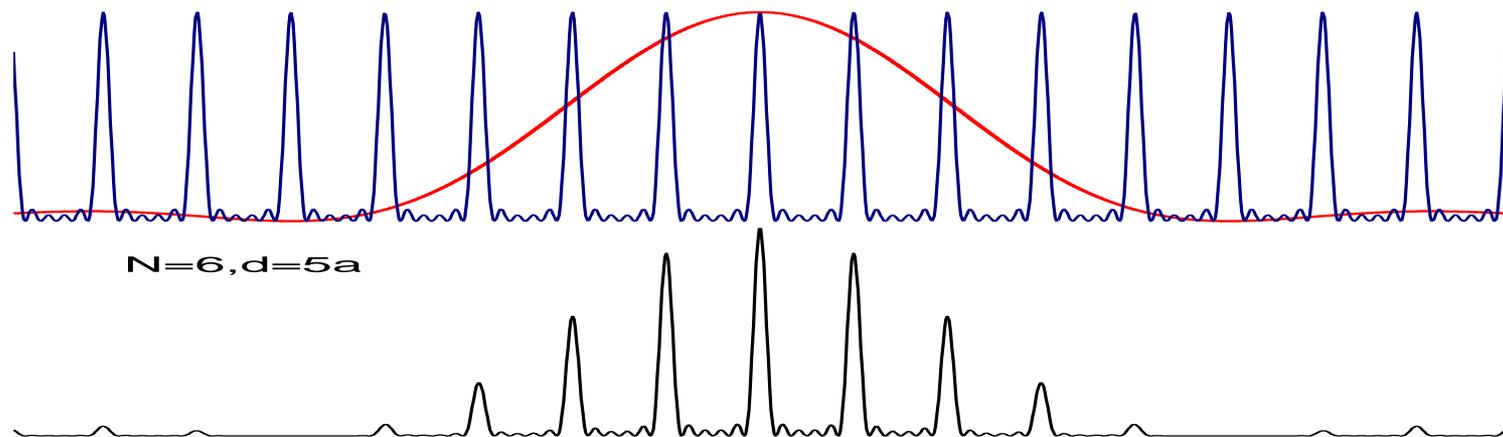


5.2 光栅光谱仪

闪耀光栅

透射光栅的缺点

光能分散，且主要集中在无色散的零级衍射上。其主要原因在于单元衍射因子、缝间干涉因子的主极强相互重叠。**能量集中是单元衍射的结果**，大部分能量都集中在几何像点（衍射的中央主极大，即衍射零级）上。对于平面光栅，单元衍射零级的位置与**缝间干涉零级**的位置恰好是重合的。



5.2 光栅光谱仪

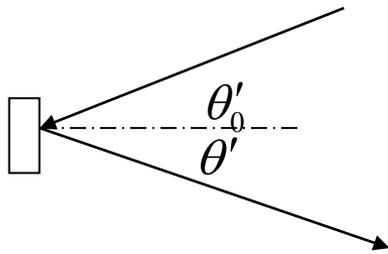
闪耀光栅

- 光栅的衍射包括**单元衍射**和**缝间干涉**两部分。
- 这两部分是各自**独立**的。以反射光栅为例说明如下

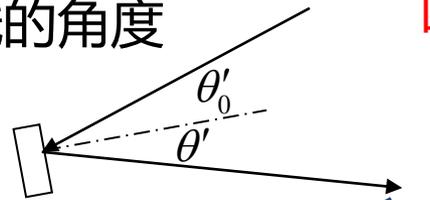
$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin \alpha}{\alpha} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2 \quad \alpha = \frac{\pi}{\lambda} a (\sin \theta' \pm \sin \theta'_0) \quad \beta = \frac{\pi}{\lambda} d (\sin \theta \pm \sin \theta_0)$$

相对于**反射面**
法线的角度

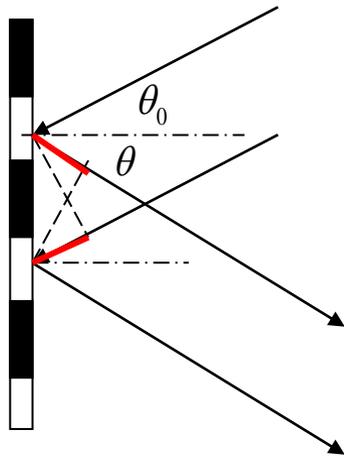
相对于**整个光栅平面**
法线的角度



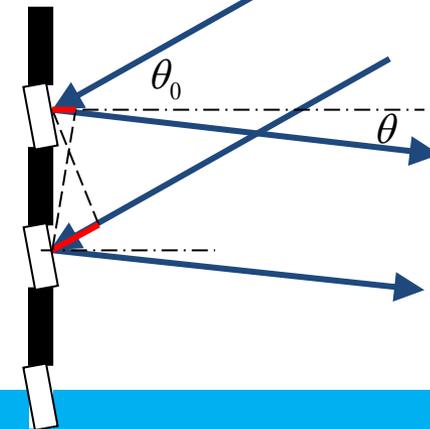
几何反射光
衍射0级



几何反射光
衍射0级



几何反射光
缝间光程差
等于0，是
缝间干涉0级



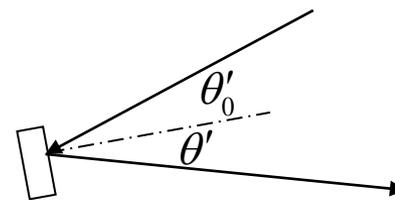
几何反射光
缝间光程差不
等于0，不是
缝间干涉0级

5.2 光栅光谱仪

关于衍射零级主极大和干涉零级主极大的说明

衍射的零级主极大

几何光学的像点是大尺度单元衍射的结果，可以近似认为是衍射的高级亮斑收缩到无限接近于零级衍射光斑，此时衍射现象不明显。随着衍射单元的缩小，衍射现象逐渐增强，各级光斑逐渐扩散，但其零级主极大的位置仍然为衍射单元成像的几何像点。如果进一步缩小衍射单元的尺度，可以认为零级主极大逐渐扩散到整个平面，此时就失去对缝间干涉的调制作用。此时，多缝相干叠加的结果基本为缝间干涉。

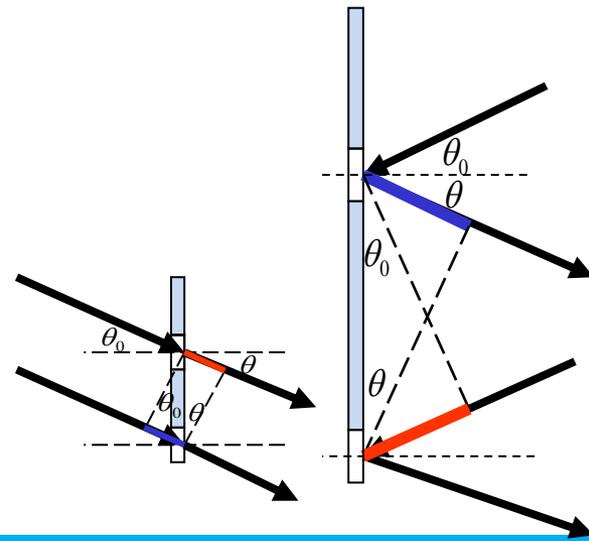


干涉的零级主极大

干涉的主极大考虑的是相邻光线之间的相干叠加，相邻光线之间的光程差由扩展的光栅方程决定。

$$d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = j\lambda$$

当 $j=0$ 时，零级主极大的条件是入射光与衍射光分处于光栅宏观平面法线的两侧，且 $\theta = \theta_0$ ，即关于光栅宏观平面法线对称。



5.2 光栅光谱仪

闪耀光栅的两种照明方式

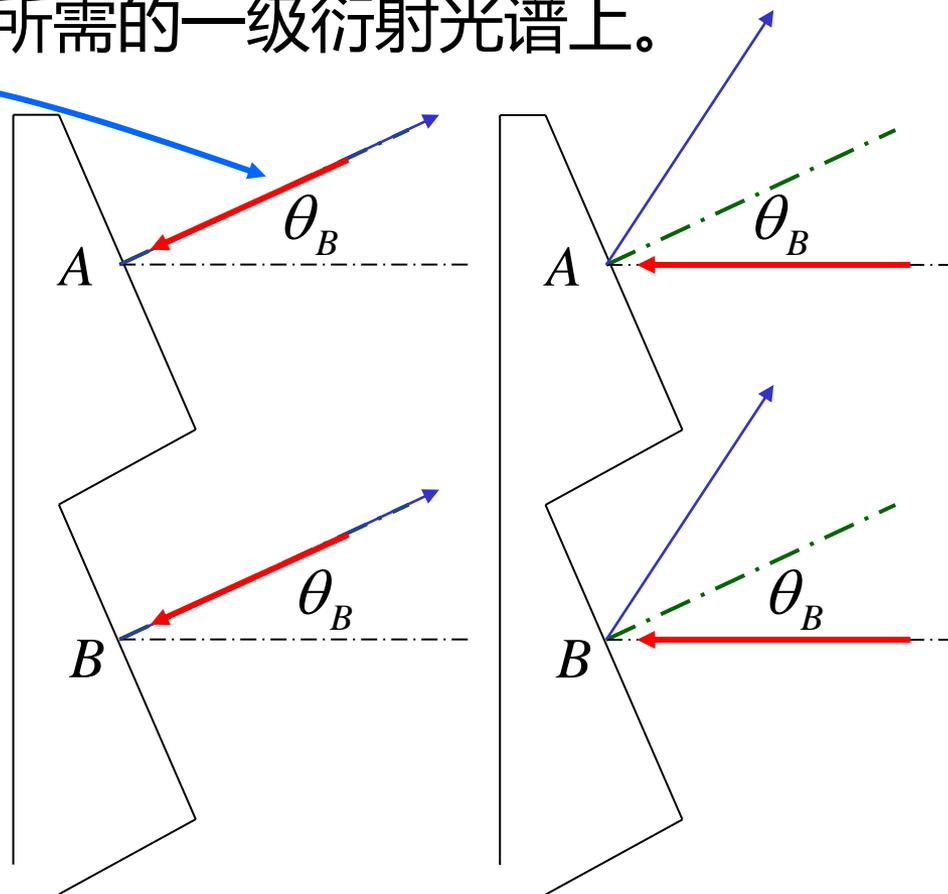
闪耀光栅（平面反射式）能将单槽衍射的零级与槽间干涉的零级错开，从而把光能集中到所需的一级衍射光谱上。

闪耀角：

槽面法线与光栅平面法线之间的夹角

“照明方式”即入射方式

- 第一种照明方式，是使入射光沿着闪耀面的法线方向，也称里特罗 (Littrow) 自准直系统。
- 第二种照明方式，是使入射光沿着光栅平面的法线方向

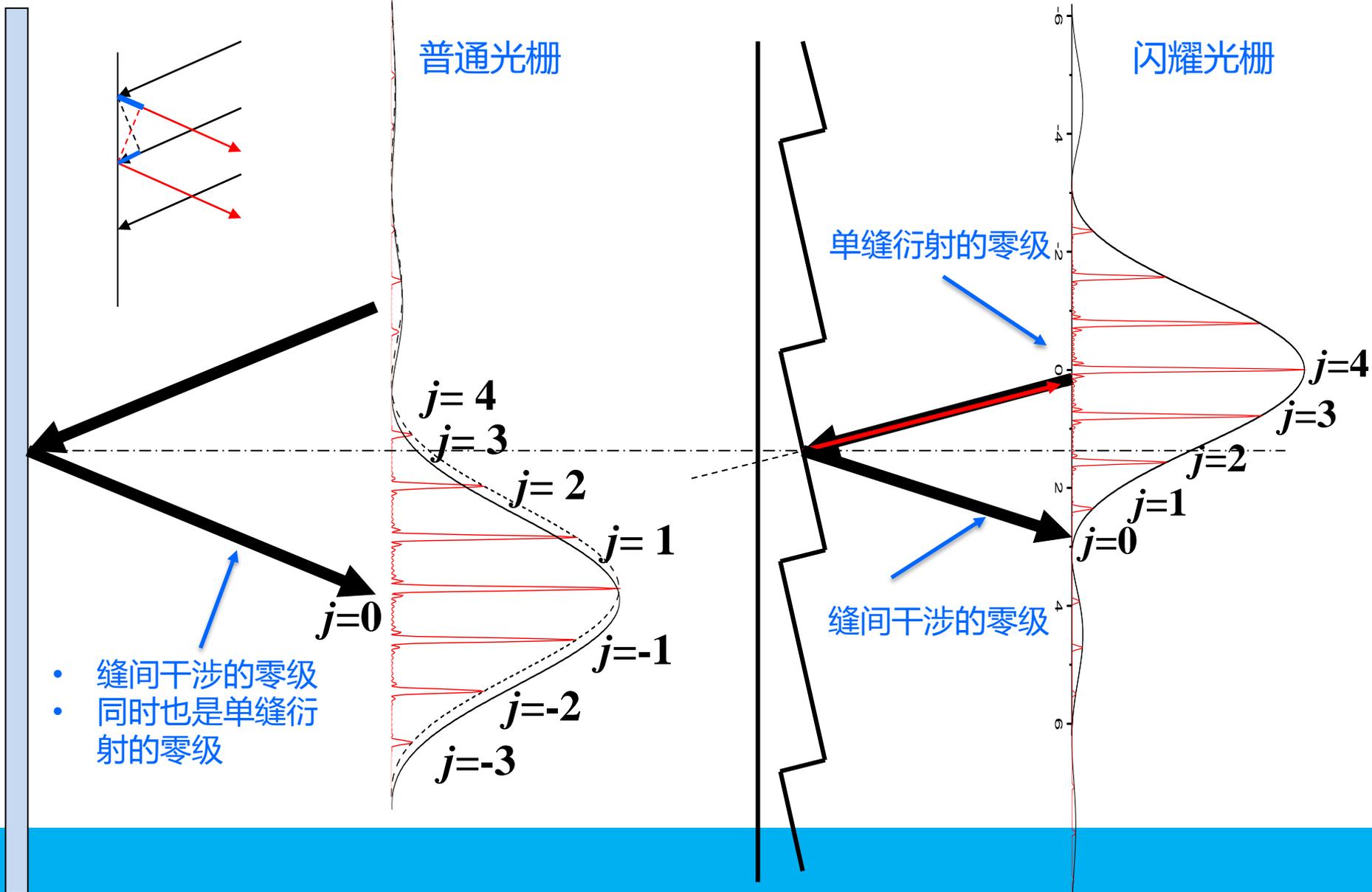


第一种照明方式

第二种照明方式

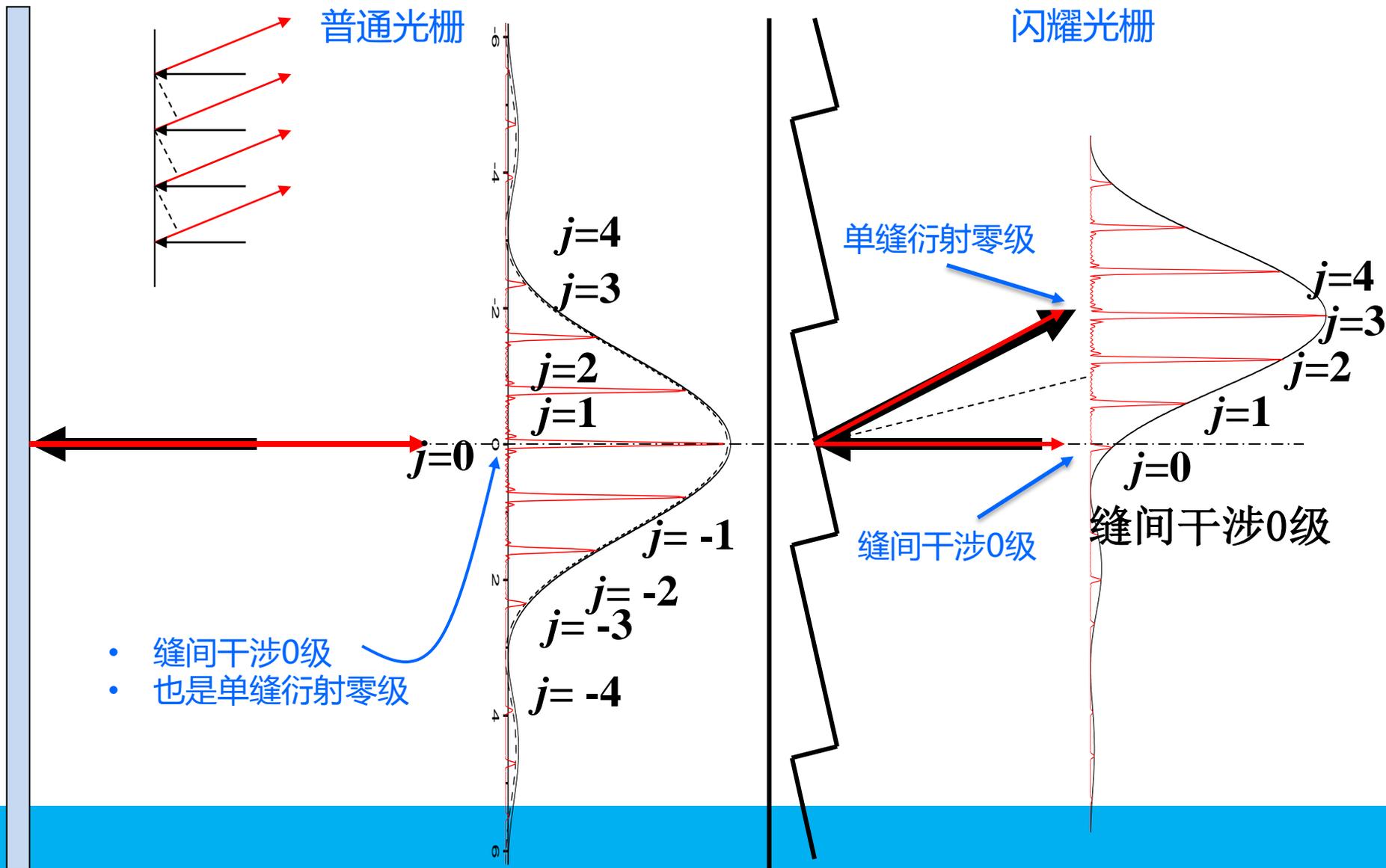
闪耀光栅的两种照明方式

照明方式一



闪耀光栅的两种照明方式

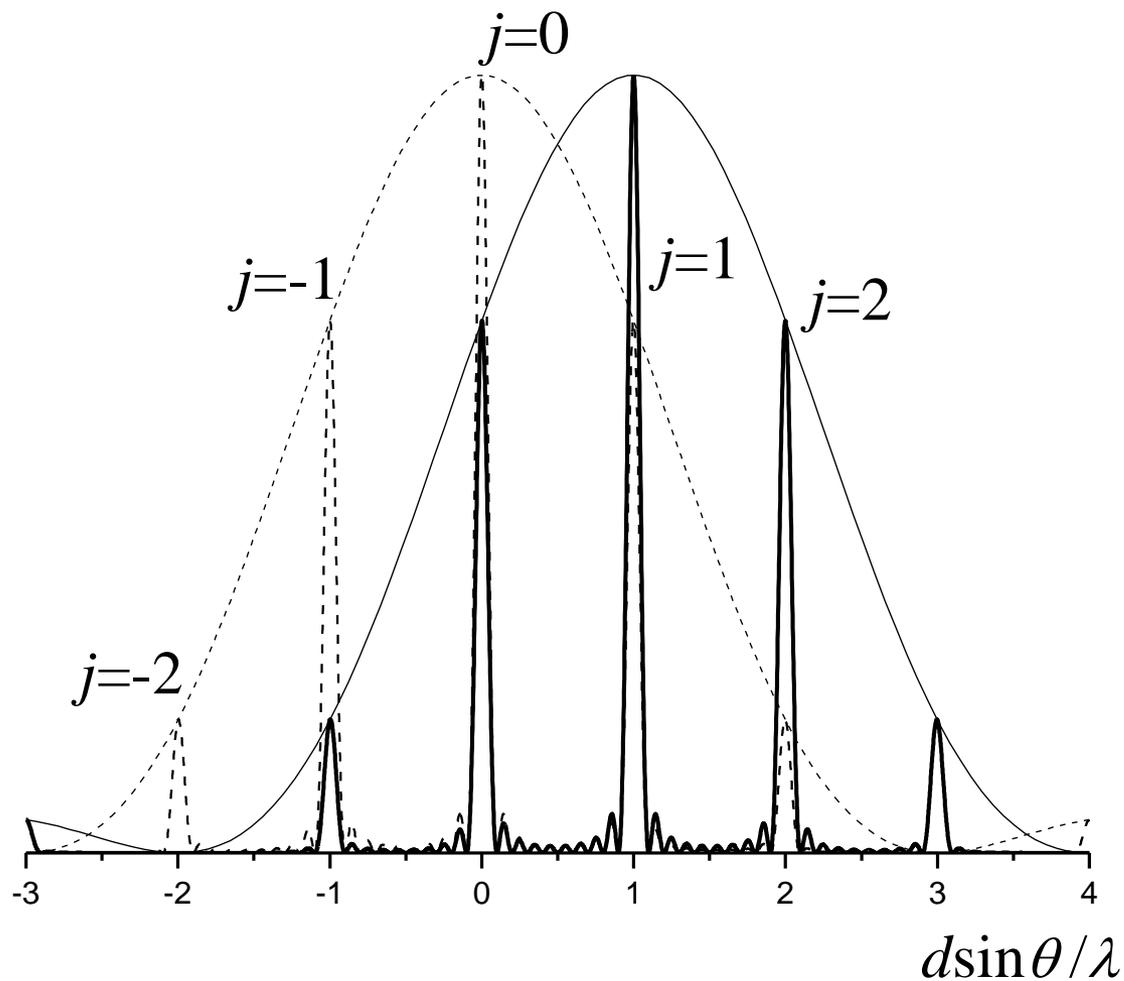
照明方式二



5.2 光栅光谱仪

闪耀光栅

单元衍射主极大的移动



5.2 光栅光谱仪

闪耀光栅两种照明方式的闪耀波长

第一种照明方式 $\theta' = \theta'_0 = 0$

相邻缝间光程差 $\Delta L = 2d \sin \theta_B$

干涉极大条件 $2d \sin \theta_B = j\lambda$

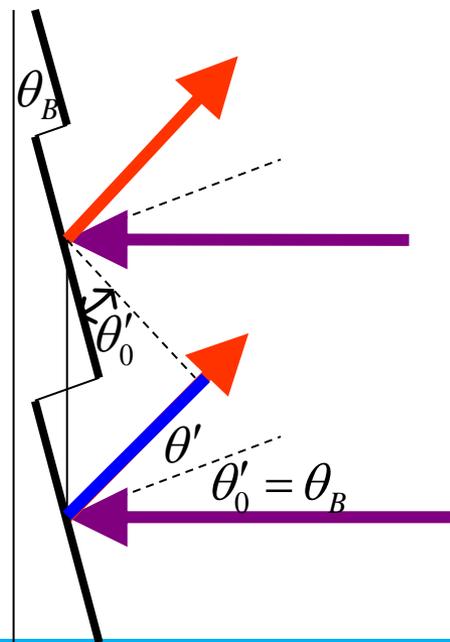
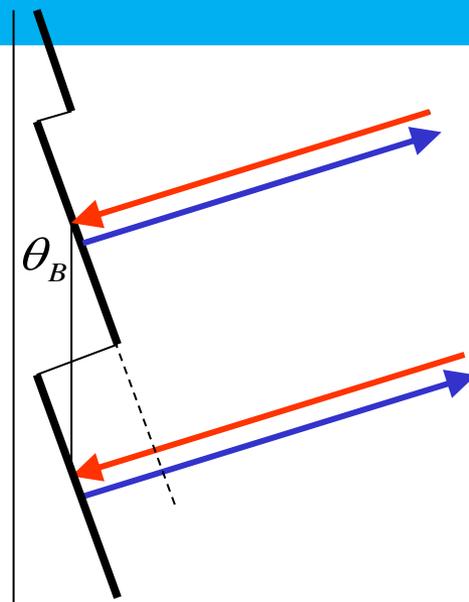
一级闪耀波长 $\lambda_{1B} = 2d \sin \theta_B$

第二种照明方式及其闪耀波长 $\theta' = \theta'_0 = \theta_B$

相邻缝间光程差 = $d \sin 2\theta_B$

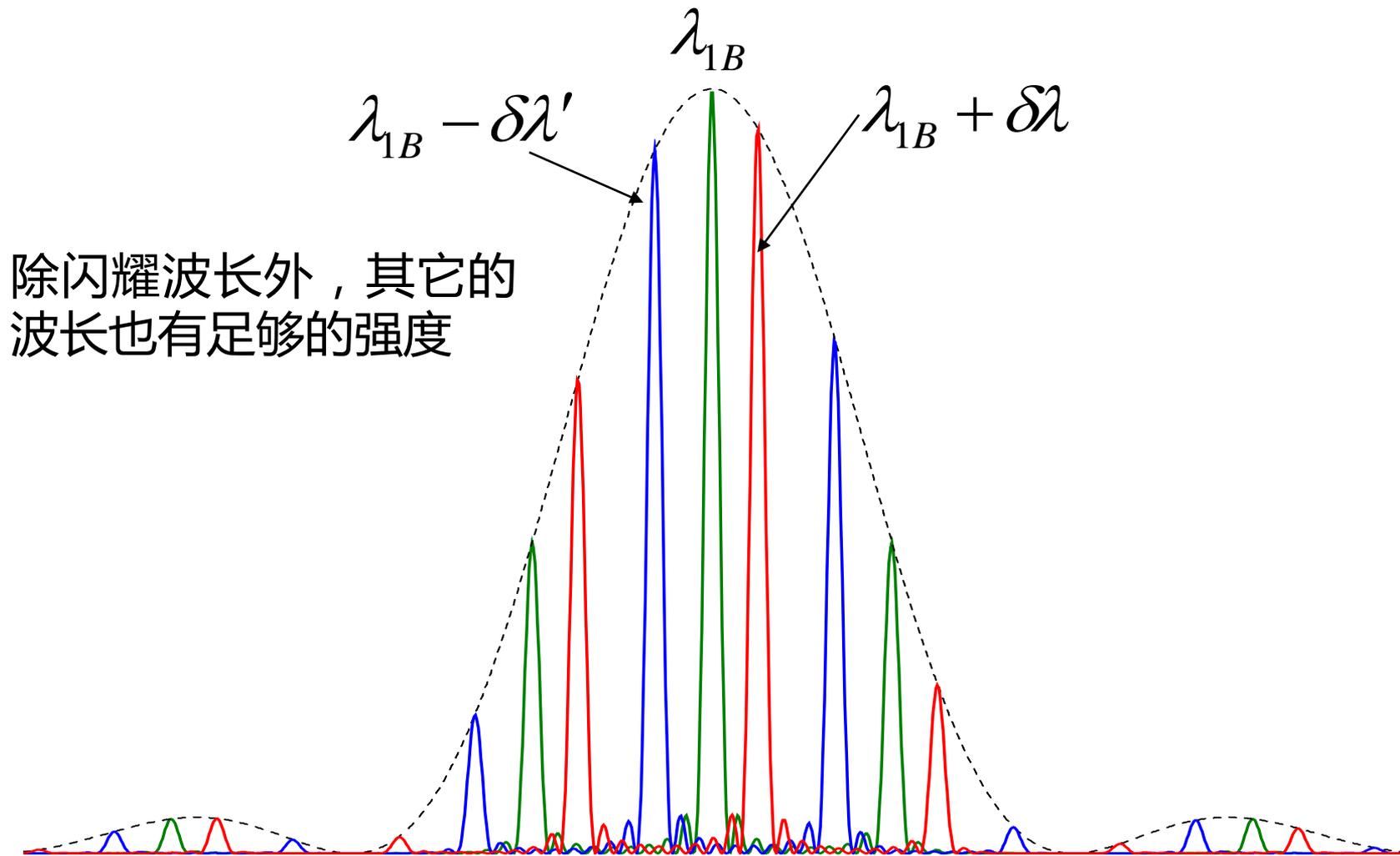
干涉极大条件 $d \sin 2\theta_B = j\lambda$

一级闪耀波长 $\lambda_{1B} = d \sin 2\theta_B$



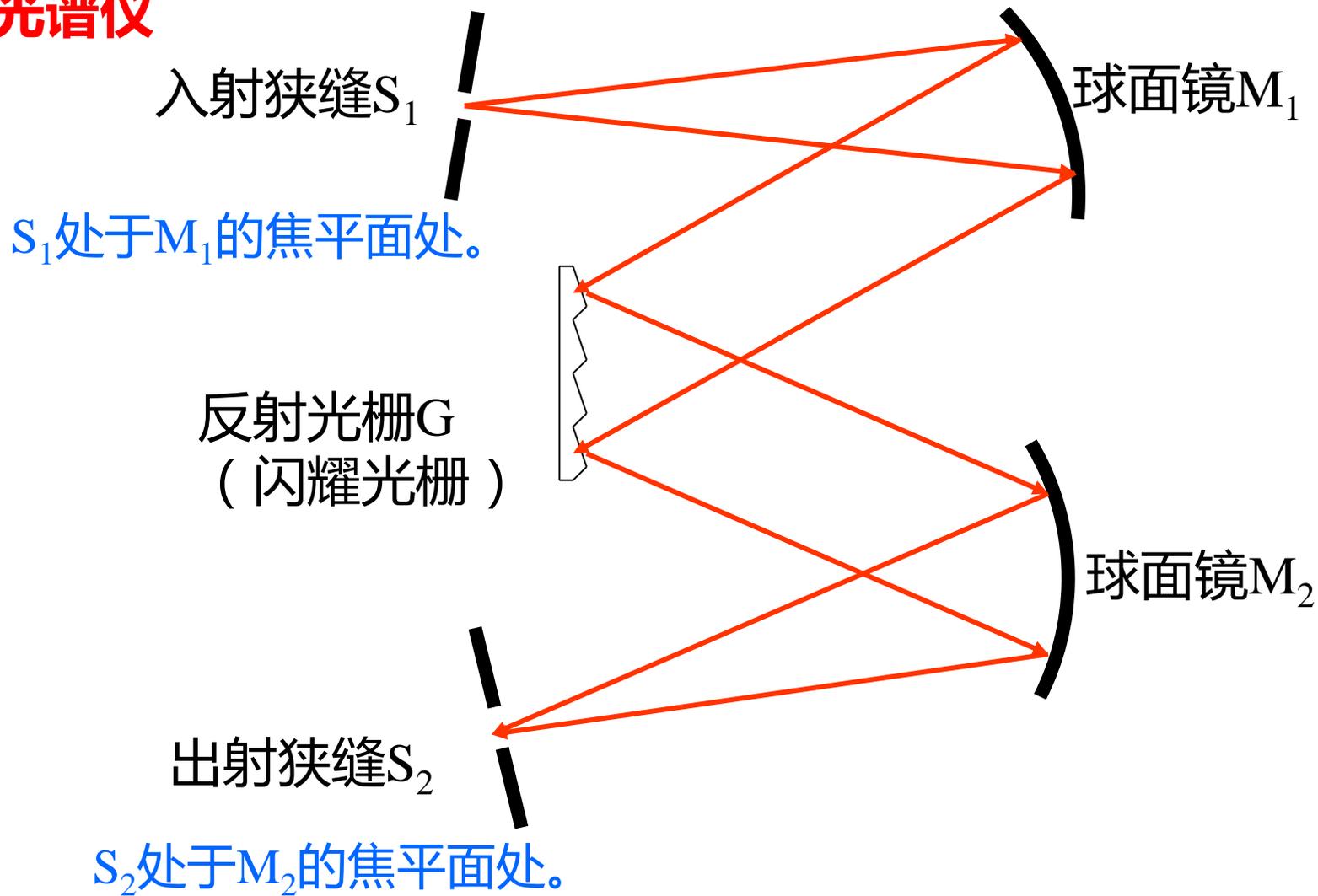
5.2 光栅光谱仪

闪耀光栅的波长容限



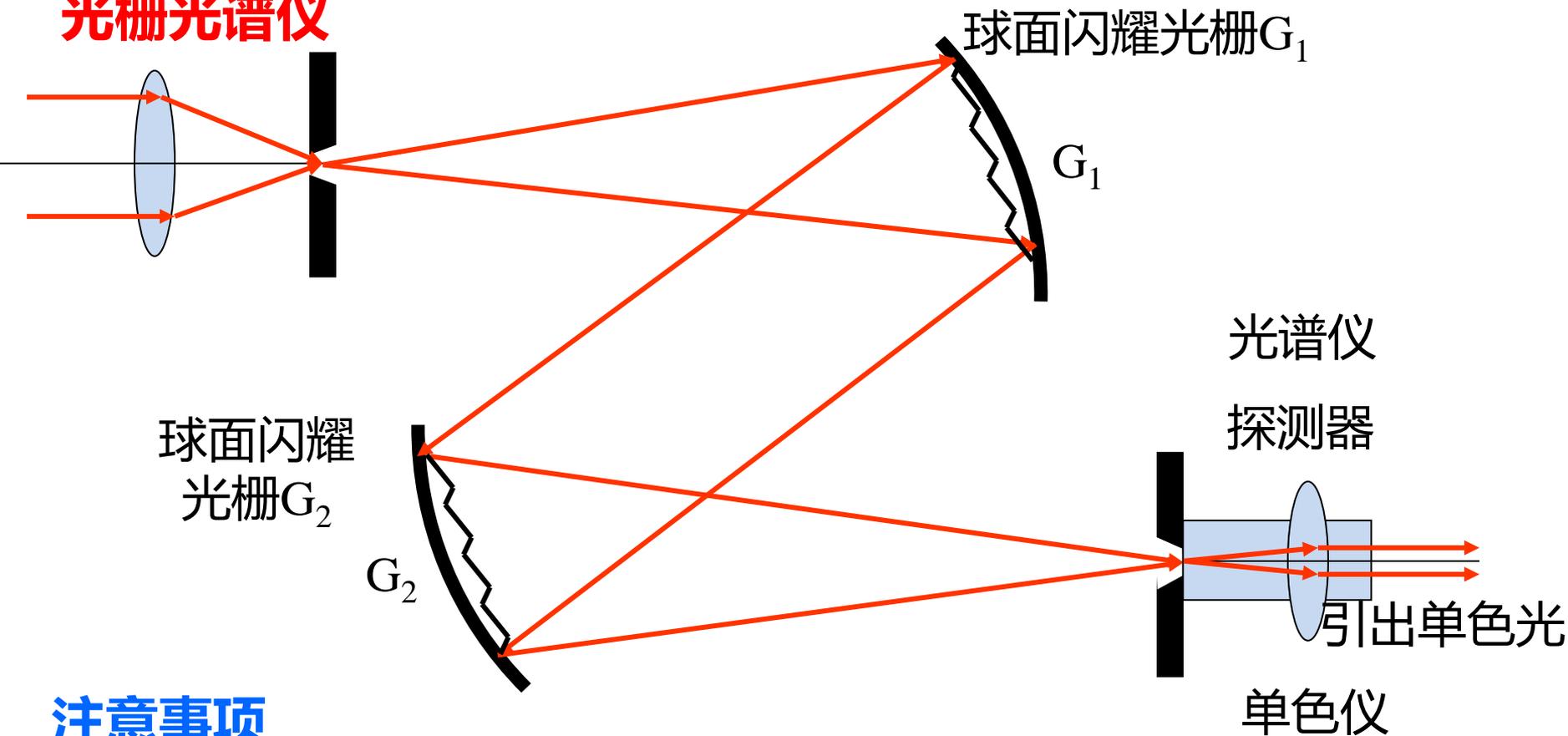
5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪



5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪

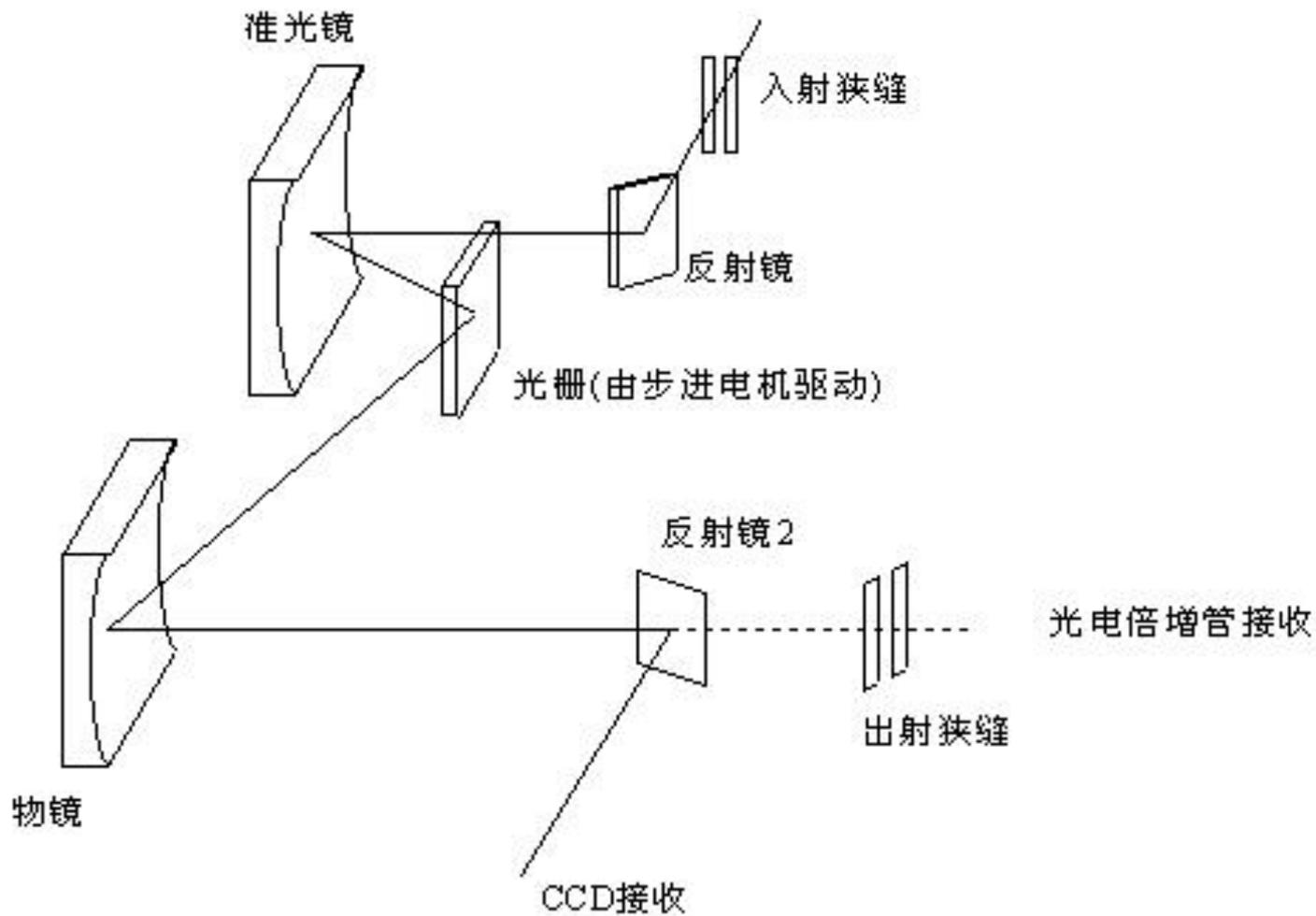


注意事项

1. 由于有单元衍射因子的调制作用，测量得到的光强不能直接作为测量结果评估光谱，谱仪需要有自身的修正曲线。
2. 使用的探测器（光电倍增管等）对于不同波长的探测效率通常有区别，因此也需要有修正曲线。

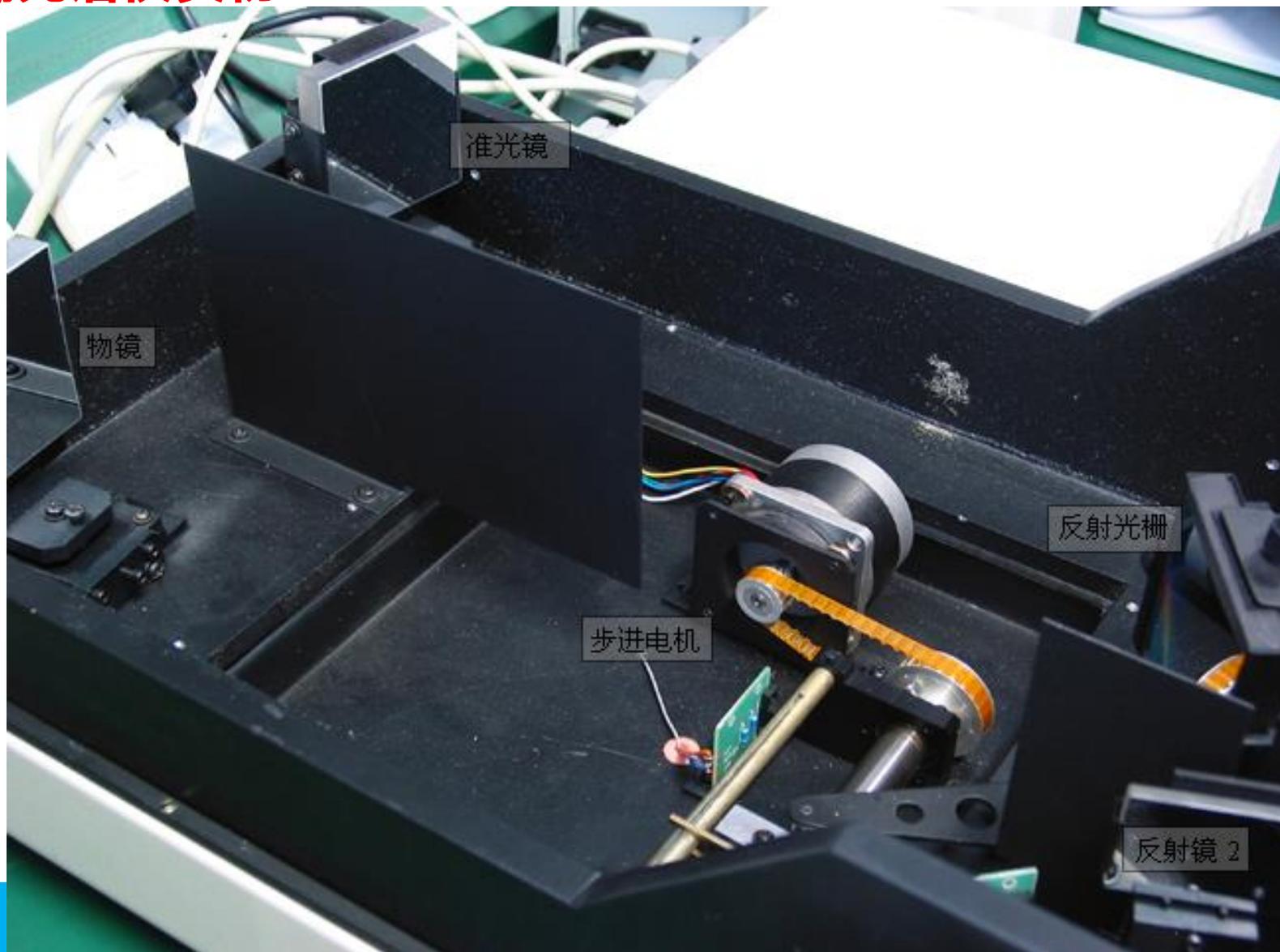
5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪实物



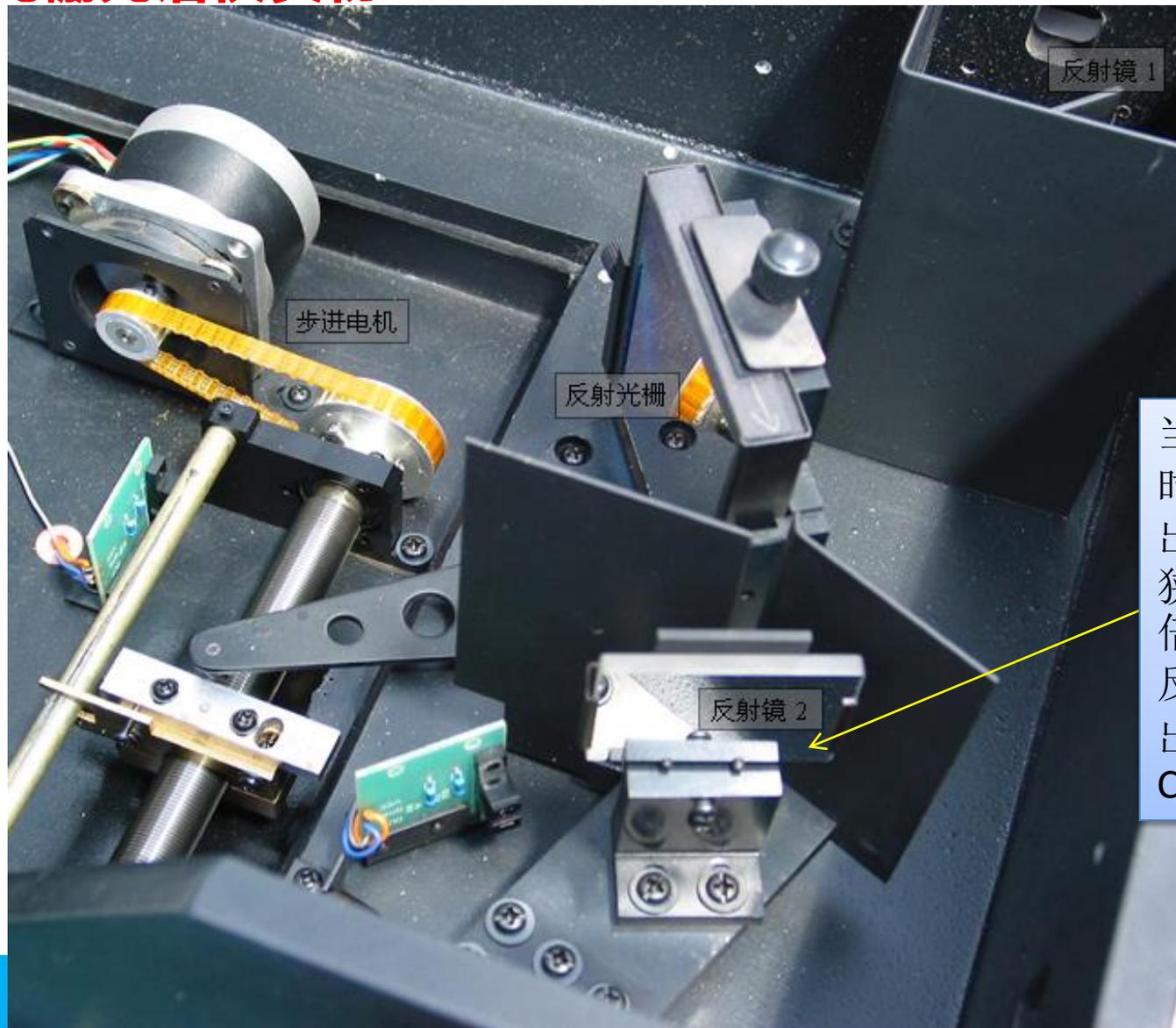
5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪实物



5.2 光栅光谱仪

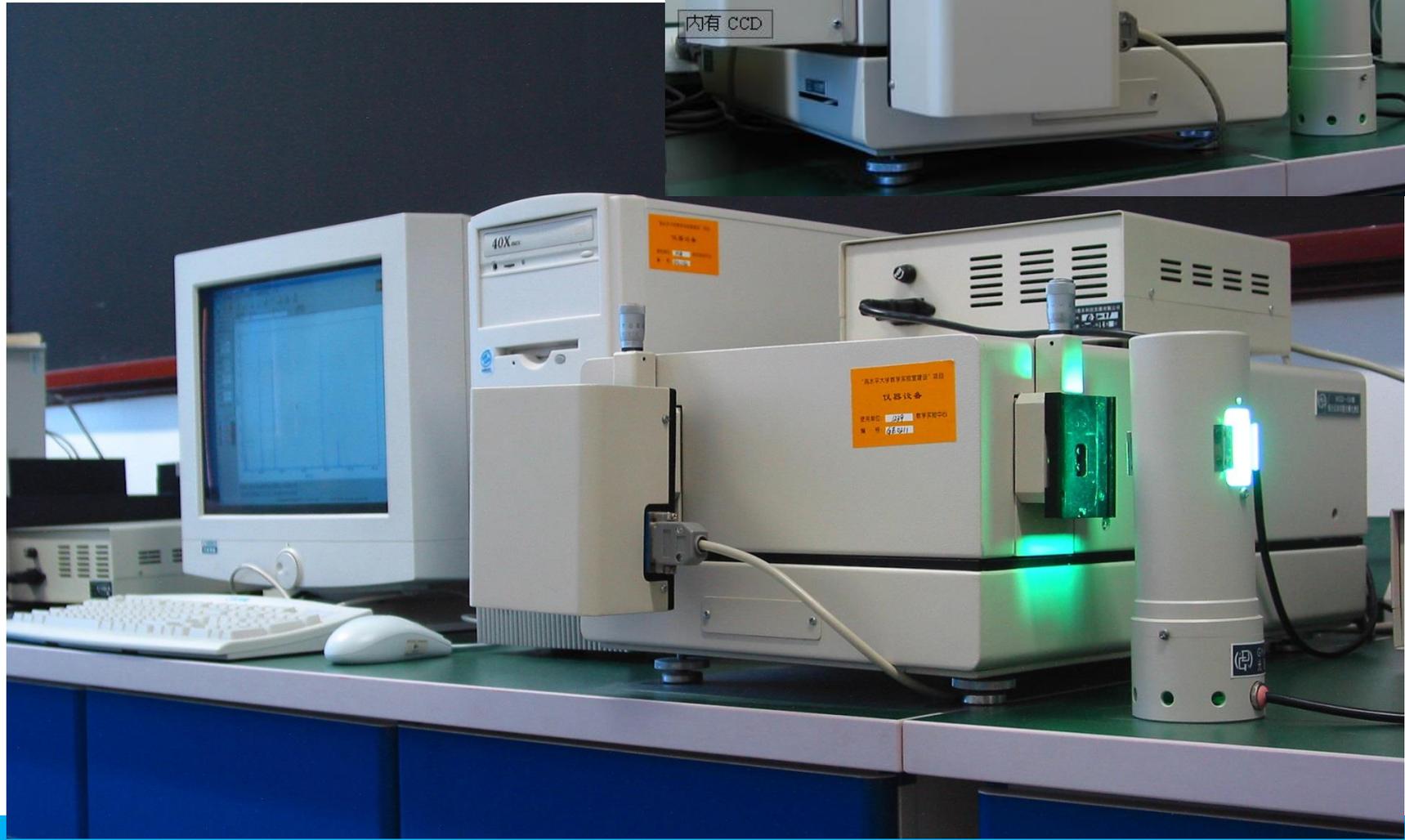
光栅光谱仪实物

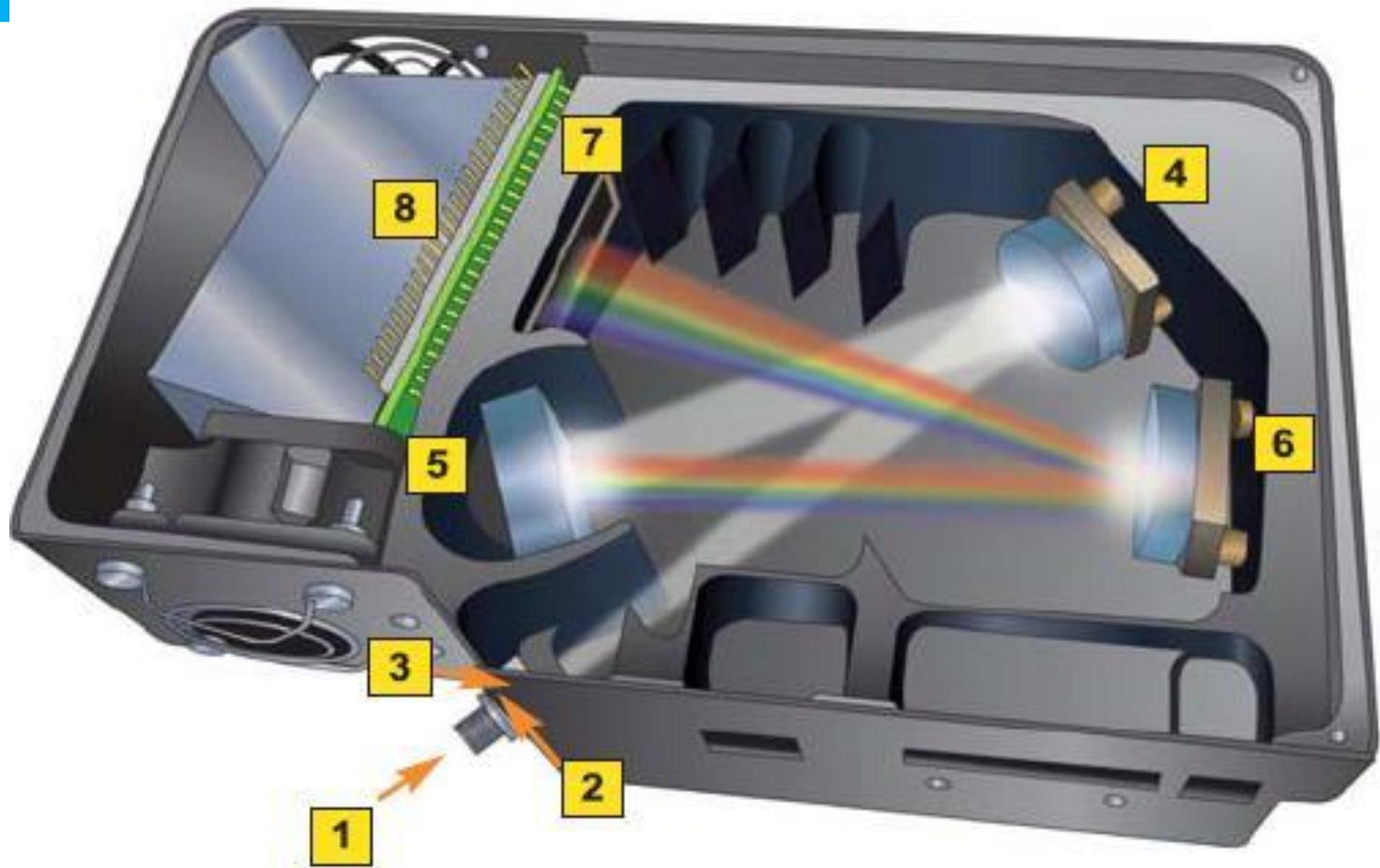


当反射镜2离开光路时，从物镜得到的出射光线直接进入狭缝，入射到光电倍增管（PMT），当反射镜2进入光路时，出射光线被反射到CCD接收器。

5.2 光栅光谱仪

光栅光谱仪实物





小型光纤光谱仪

第五节 衍射光栅

5.1 多缝夫琅禾费衍射

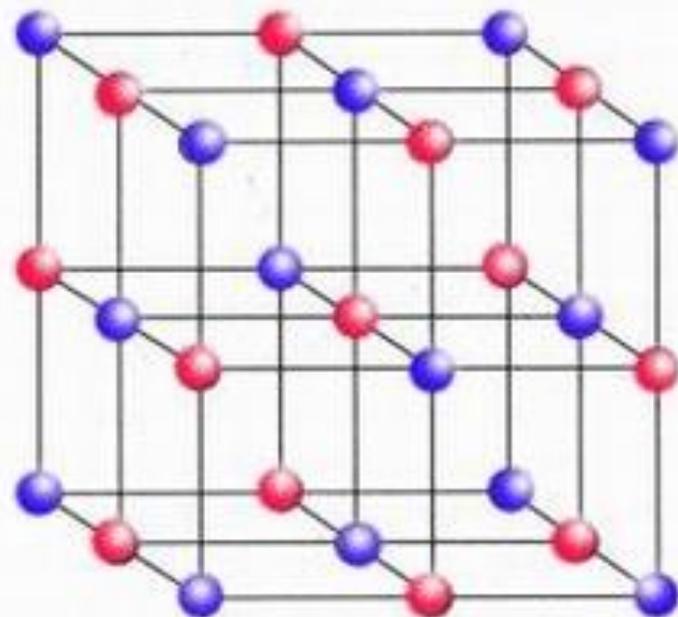
5.2 光栅光谱仪

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

晶体的概念

晶体：外部具有规则的几何形状，内部原子具有周期性的排列结构，被称为有序或空间对称。



5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

单晶体与多晶体

- ① 固体分为晶体和非晶体，晶体可分为单晶体和多晶体。
- ② 单晶体：晶体内部原子都按周期性排列，如：食盐、雪花、天然水晶、单晶冰糖等。
- ③ 多晶体：晶体内部局部区域里原子按照周期性规则排列，但不同区域之间原子的排列并不相同。多晶体也可以看做是许多取向不同的小单晶体（晶粒）组成的。多晶体有金属、陶瓷、石头、陨石等。



食盐



雪花



单晶冰糖



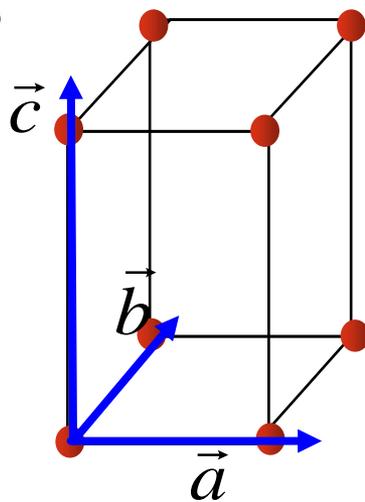
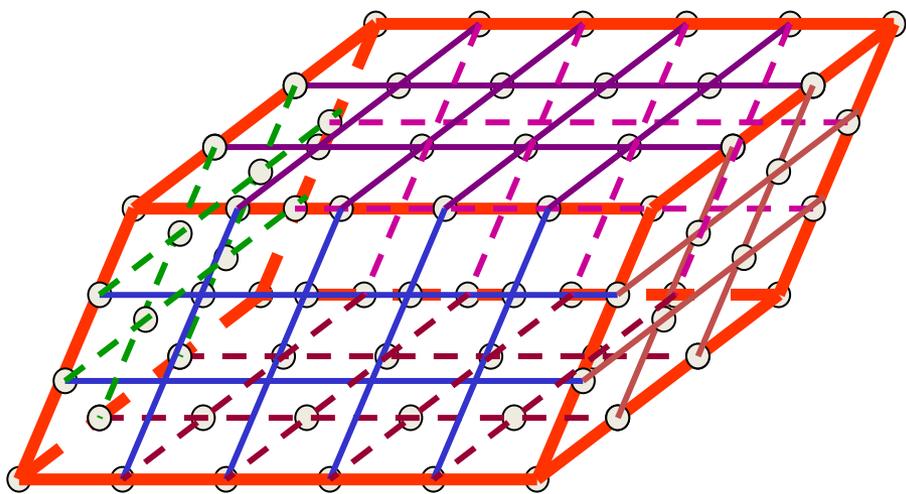
多晶冰糖

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

晶格与晶格常数

晶格：从周期结构中抽象出来的等同点称为晶格或空间点阵。

晶格常数：相邻格点（等同点）之间的间隔。

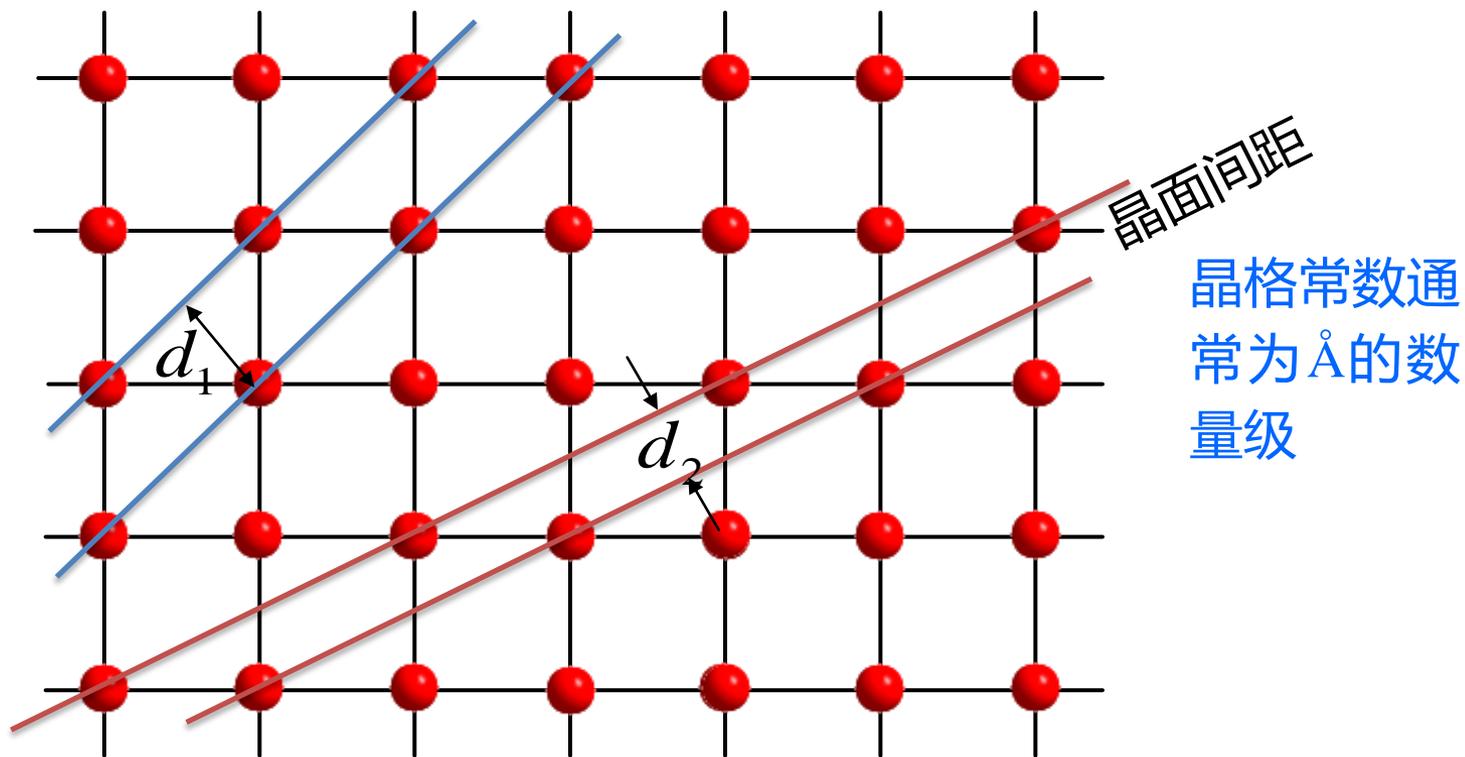


晶体的每一个结构单元，即基元，可以是原子、分子或离子基团，在图中用一个点表示。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

晶面

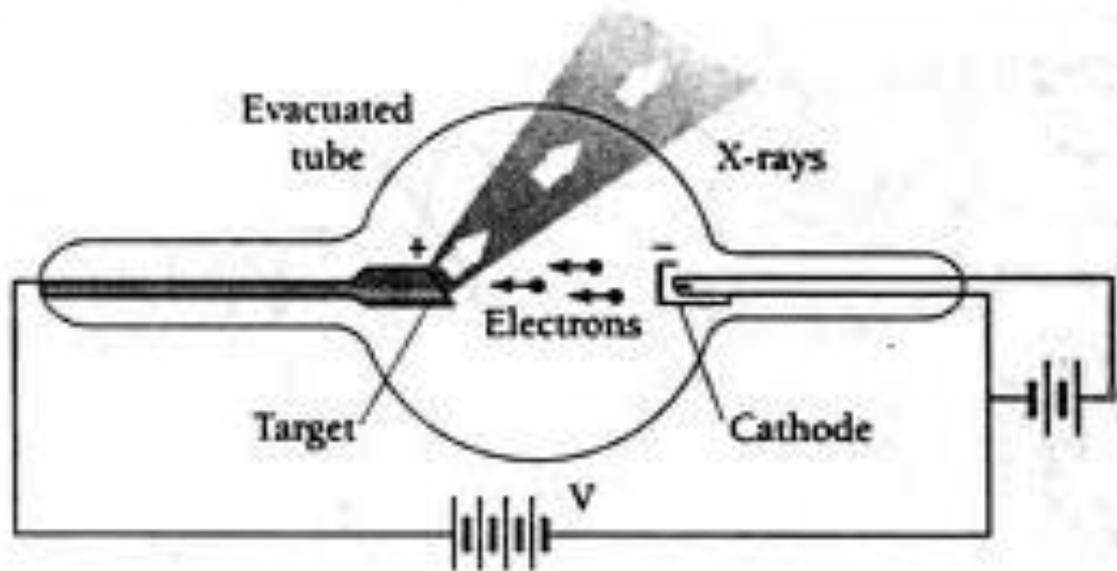
格点构成的平面。晶体中有很多晶面族，不同的晶面族有不同的间距，即晶格常数 d 不同。



5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

X射线

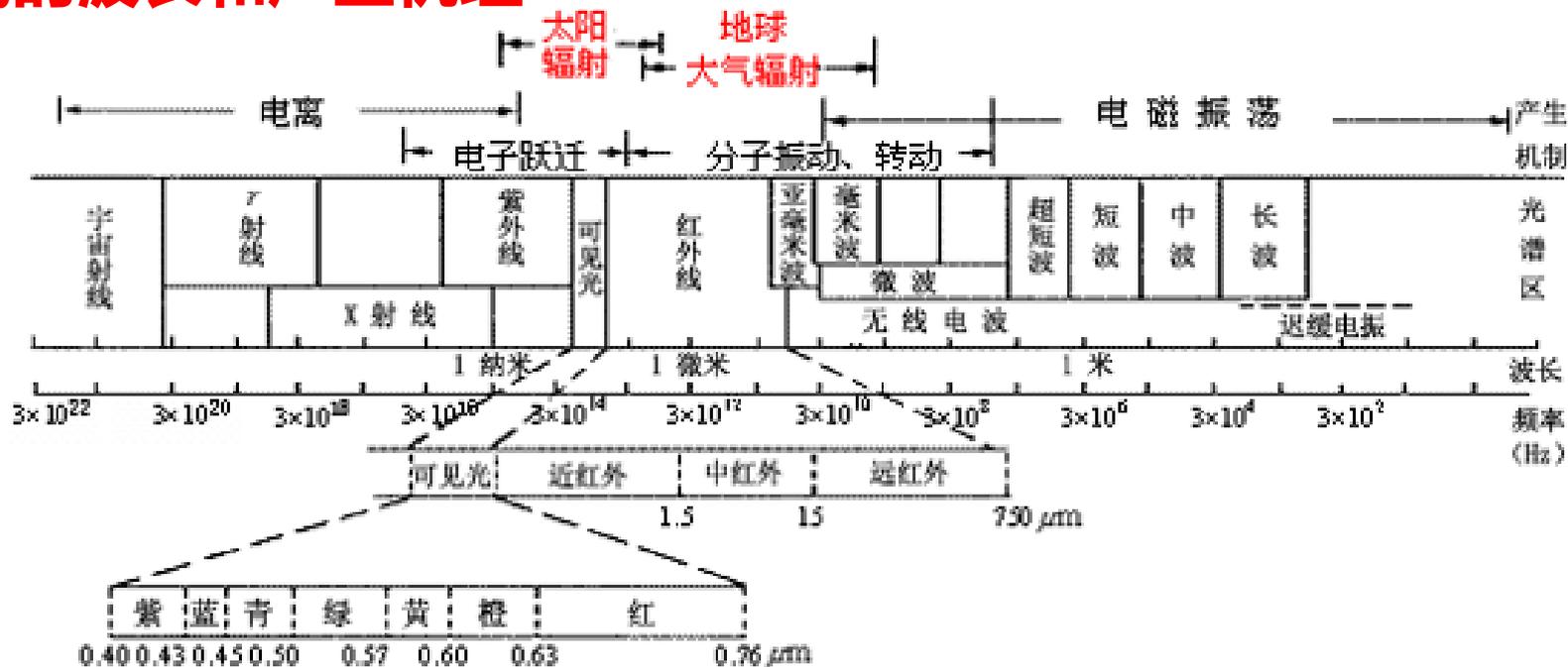
X射线，又称伦琴射线（W.K.Röntgen, 1895）：是一种短波（ $\lambda : 10\text{Å} - 10^{-2}\text{Å}$ ）电磁波，与原子间距、晶面间距相当。



布鲁克斯管

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

X射线的波长和产生机理



X射线的波长范围($10\text{\AA} \sim 10^{-2}\text{\AA}$)和紫外线、 γ 射线有重合的部分，因此单纯以波长来判断是否是X射线是不够完善的，应该从其发生机理来判断。

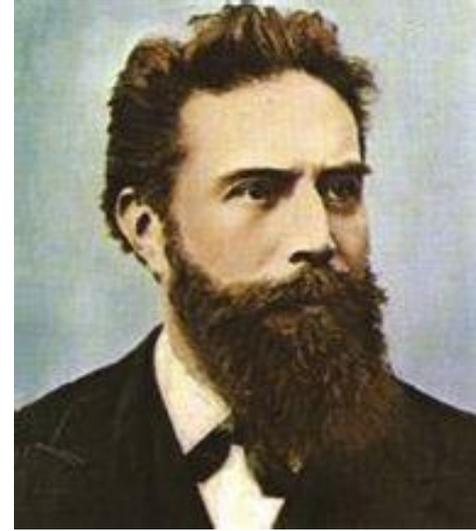
X射线的产生机理：

1. 原子的内层电子跃迁。（波长短、能量高、能差大的能级之间跃迁）
2. 带电粒子的加速，向外辐射电磁波，粒子速度越高，辐射的能量越高，波长越短。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

X射线的发展史

- ① 1895年，伦琴发现X射线。
- ② 1912年，劳尔（德国）发现X射线通过晶体时产生的衍射现象，证明了X射线的波动性和晶体内部结构的周期性。
- ③ 1912年，小布拉格成功解释了劳尔实验，即X射线晶体衍射的形成。提出了著名的布拉格公式。
- ④ 1913年，老布拉格设计出第一台X射线分光计，并用其发现了特征X射线，成功测定了金刚石的晶体结构。



威廉·康拉德·伦琴
(1845-1923)
1901诺贝尔物理学奖

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

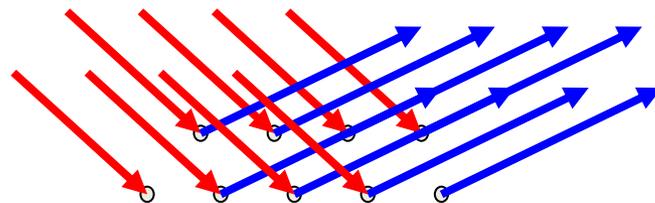
X射线在晶体上的衍射

过程

(1) 从电磁波的角度来看，X射线入射到晶体后再出射，是X射线和晶体中的带电离子相互作用的结果，带电离子在外加电磁场作用下做受迫振动，发出的电磁波等效于散射过程。

(2) 入射的X射线可以被其中的每一个格点散射，散射电磁波进行相干叠加，产生衍射。衍射有一系列的衍射极大值，衍射极大值的方向就是X射线出射的方向。

(3) 晶面之间进行干涉叠加。



说明

(1) 晶体的周期性空间结构可以作为衍射光栅——一种**三维光栅**。

(2) 由于晶格常数通常比可见光的波长小得多，因此可见光无法在晶体中产生衍射；X射线的波长和晶格常数匹配，可以产生衍射。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

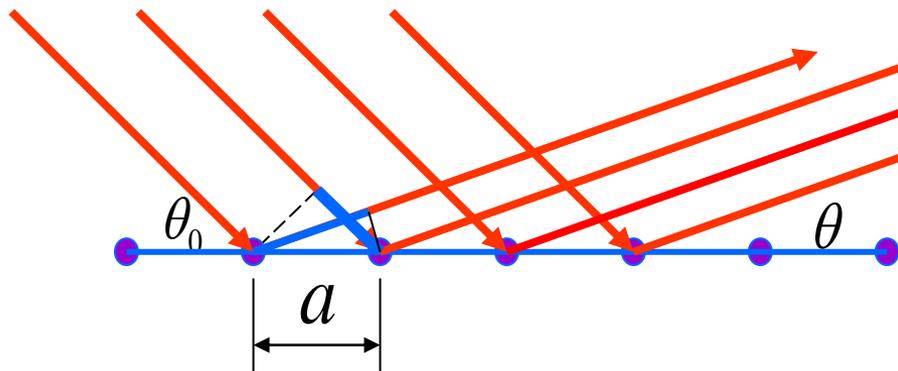
分析方法

首先计算每一个晶面上不同点间的相干叠加，即点间干涉，或称为晶面的衍射。再计算面间干涉。

与一维光栅对比

- 格点—单缝（衍射单元）
- 散射波—多光束干涉（缝间干涉）
- 晶格常数—光栅常数

X射线衍射的分析—（1）点间（面内）干涉



$$\delta = a \cos \theta - a \cos \theta_0$$

θ —衍射线相对晶面的掠射角。

θ_0 —入射线相对晶面的掠射角。

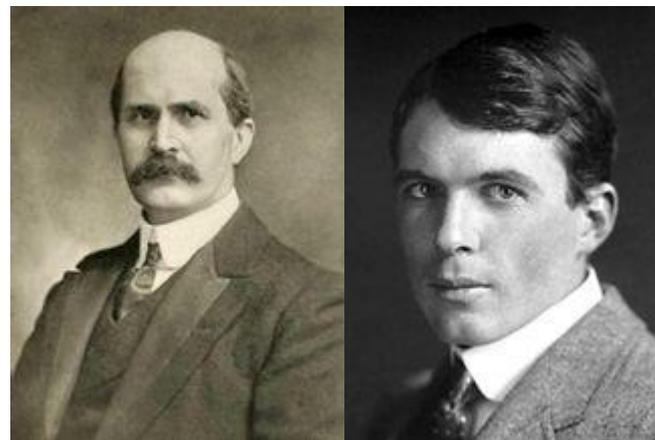
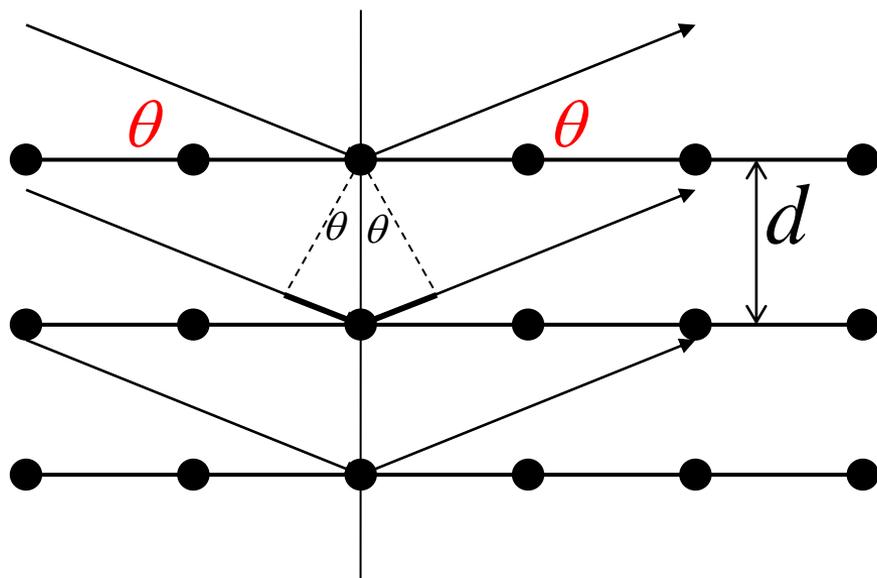
光程差为0的条件： $\theta = \theta_0$

衍射光的能量大部分集中于衍射的零级，即中央主极大。因此，晶面衍射的**极大条件是** $\theta = \theta_0$ 。即二维点阵的零级主极强方向在以晶面为镜面的反射方向上。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

X射线衍射的分析—(2) 面间干涉

晶体衍射的Bragg条件 (Bragg方程)。



威廉·亨利·布
拉格 (1862-
1942)

威廉·劳伦
斯·布拉格
(1890-1971)

1915诺贝尔物理学奖
(使用X射线研究晶体结构)

$$\Delta = d \sin \theta + d \sin \theta = 2d \sin \theta$$

取极大值的条件为 $2d \sin \theta = k\lambda$ 即 **Bragg条件**

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

布拉格方程与光栅方程的区别

光栅方程 $d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = k\lambda$

Bragg方程 $2d \sin \theta = k\lambda$

两者形式相近，是否可以认为当光栅方程的 $\theta=\theta_0$ 时，即为布拉格方程？

光栅方程与Bragg方程**不能直接等同**：

- ① 两者的角度定义不同。光栅方程中的 θ 和 θ_0 是与衍射面法线方向的夹角，而布拉格方程的 θ 和 θ_0 是对于衍射平面的夹角。由于很多情况下很难同时满足入射方向、晶体取向和入射波长的要求，因此可能没有主极大。
- ② 由于晶体中有多个晶面族，因此也有一系列布拉格条件；而一维光栅对于给定的入射方向只有一个光栅方程。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

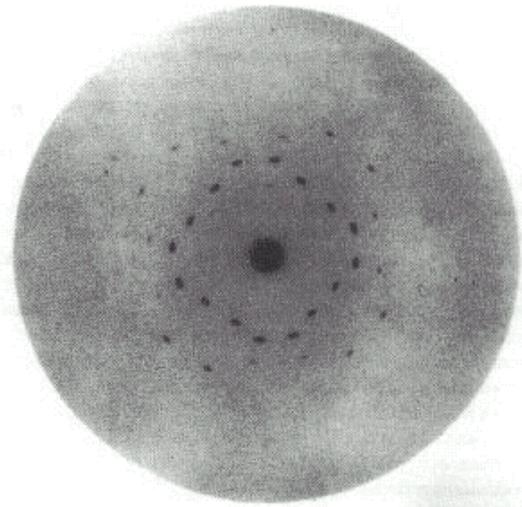
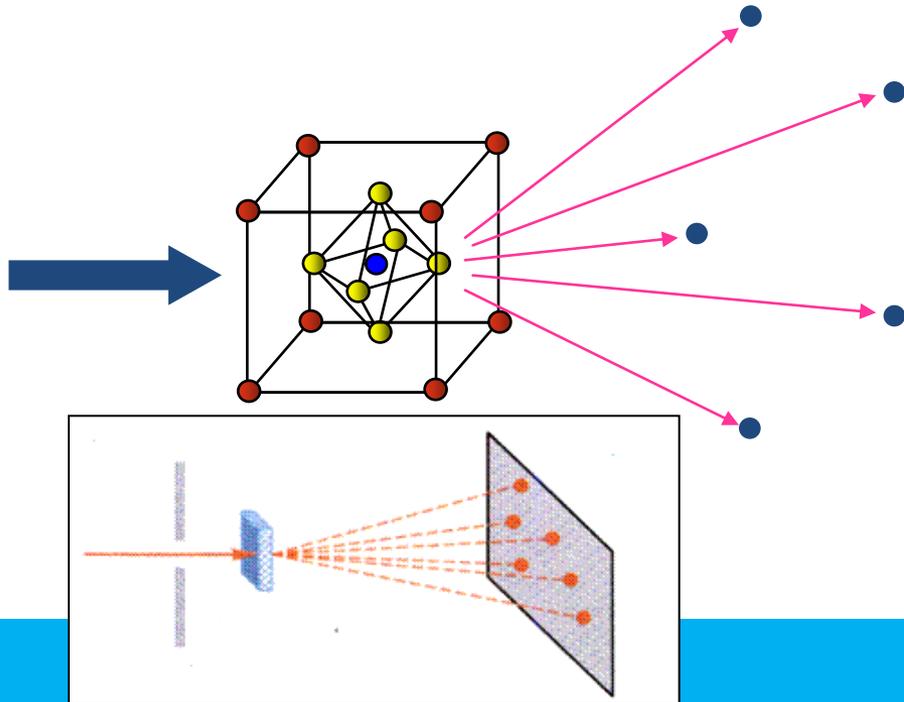
劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

方法：

不同时限定入射方向、晶体取向和光波波长。

(1) 劳厄法 (不固定波长)

连续谱X射线与单晶作用，角度固定，晶面从入射波长中选择满足衍射条件的波长，形成劳厄斑；



劳厄 M. von

(1879-1960)

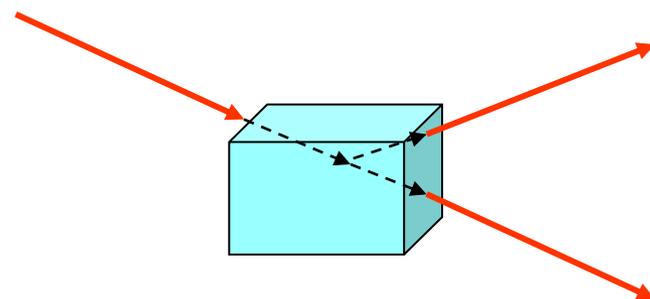
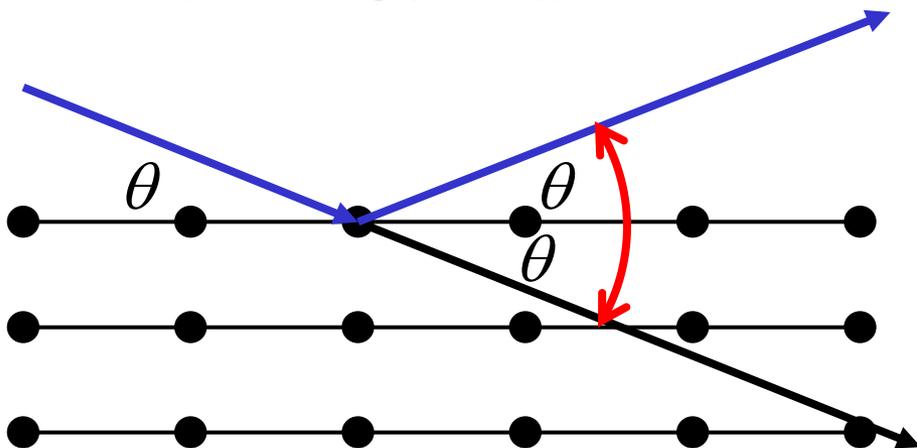
1914 Nobel Laureate

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(1) 劳厄法

X射线偏转 2θ 角。



$$2d \sin \theta = j\lambda$$

说明

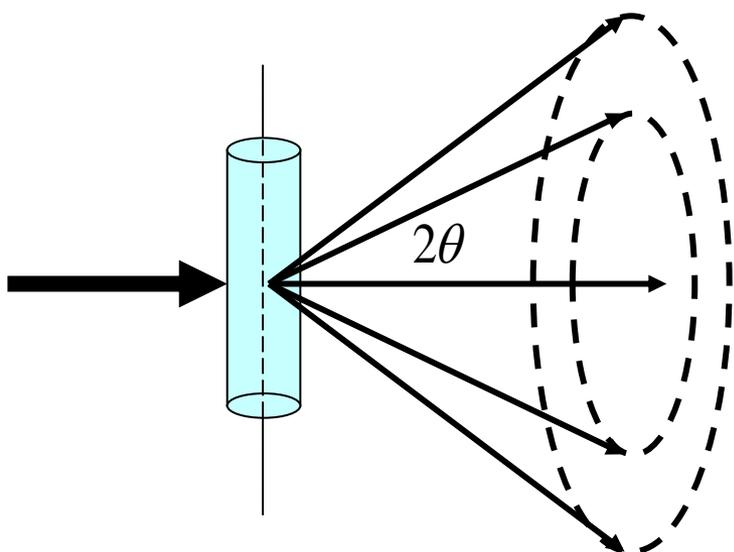
适合测量单晶体，计算 d 需要知道 λ ， λ 可以在实验上测量。

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

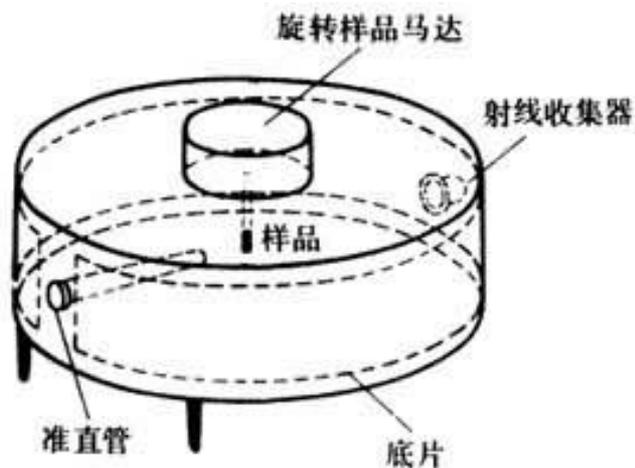
劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(2) 德拜法 (限定波长但不限定晶体取向)

单色X射线与多晶体作用，大量无规取向的多晶晶粒提供满足布喇格条件的充分可能性，形成德拜环。



$$2d \sin \theta = j\lambda$$



德拜(1884-1966) , 1936年诺贝尔化学奖

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

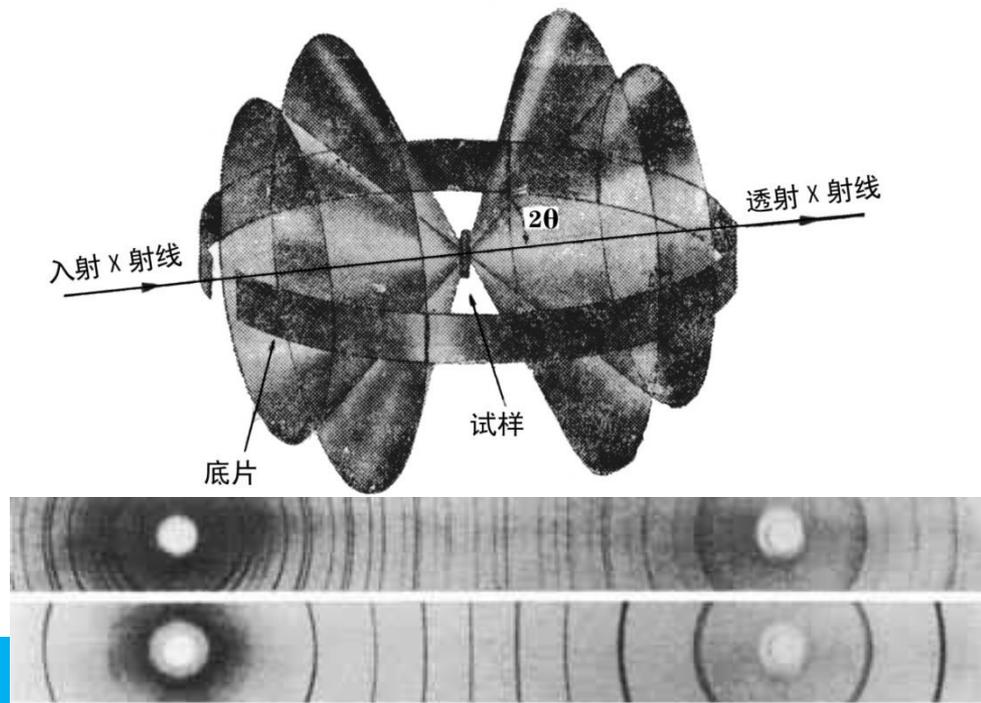
(2) 德拜法

实验注意要点：

- ① 粉末大小适度 ($10^{-3} \sim 10^{-5} \text{cm}$)。
- ② 样品尺度适合操作 (直径 $0.2 \sim 0.8 \text{mm}$) , 粉末之间无明显应力。
- ③ 粉末制备过程：粉碎 (塑性材料研磨、韧性材料挫) 、研磨、过筛 (250~320目) 。

样品制备方法：

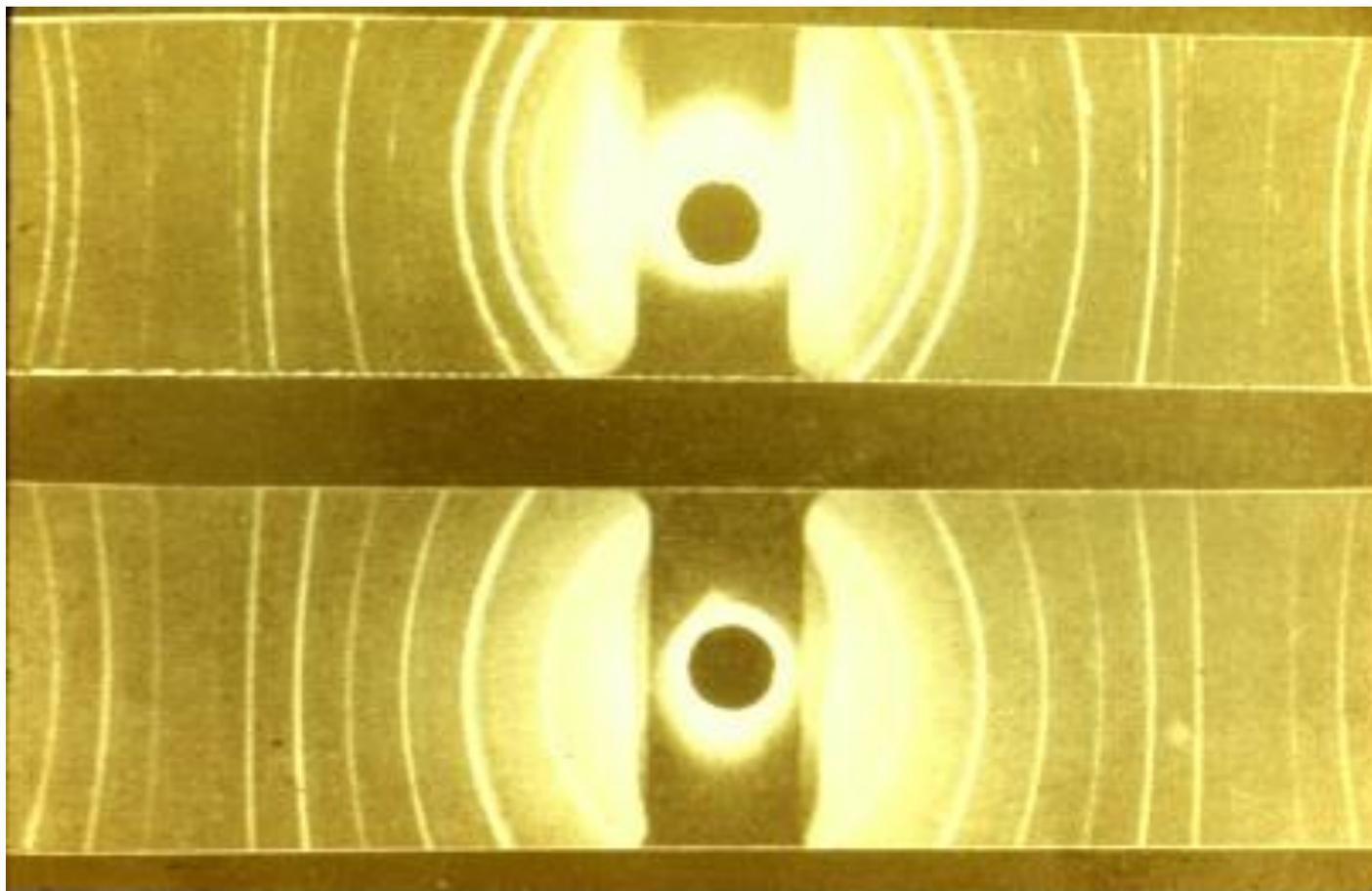
- ① 细玻璃丝涂胶，通过转动粘结粉末；
- ② 将粉末填入石英、玻璃毛细管；
- ③ 使用胶水混合粉末成为糊状，将其注入毛细管，从另一端挤出 $2 \sim 3 \text{mm}$ 作为试样。



5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(2) 德拜法



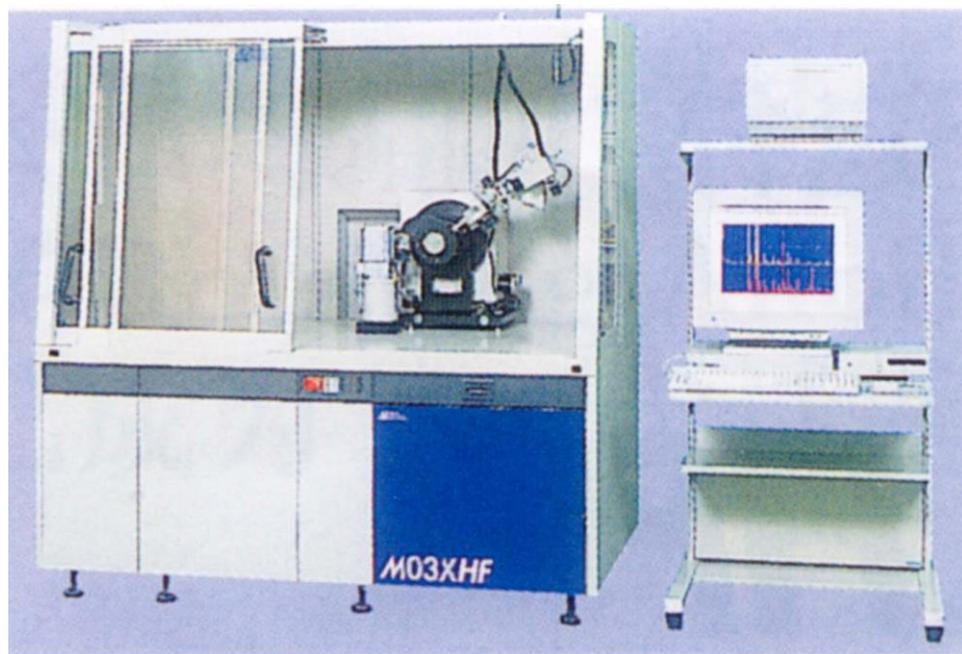
德拜法所得衍射像，上半图是金，下半图是食盐

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(3) 衍射仪法

1913年布拉格父子设计的X射线衍射装置是衍射仪的早期雏形。

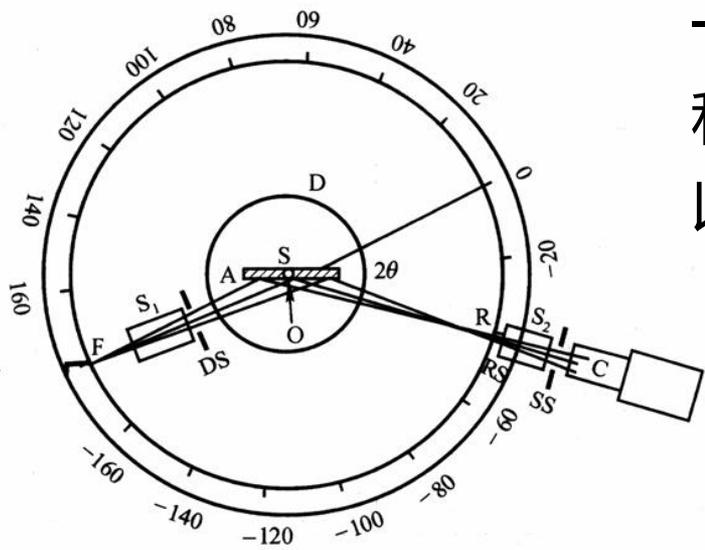


5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

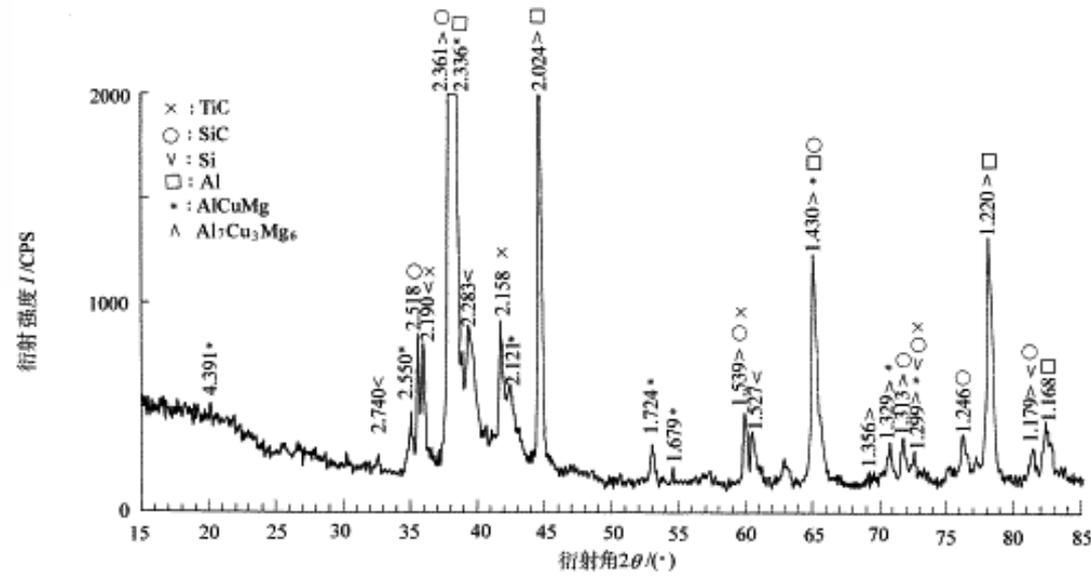
劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(3) 衍射仪法

探测器由低 θ 角到高 θ 角转动的过程中将逐一探测和记录各条衍射线的位置 (2θ 角度) 和强度。探测器的扫描范围从 -20° 到 $+165^\circ$ ，以保证接收到所有衍射线。



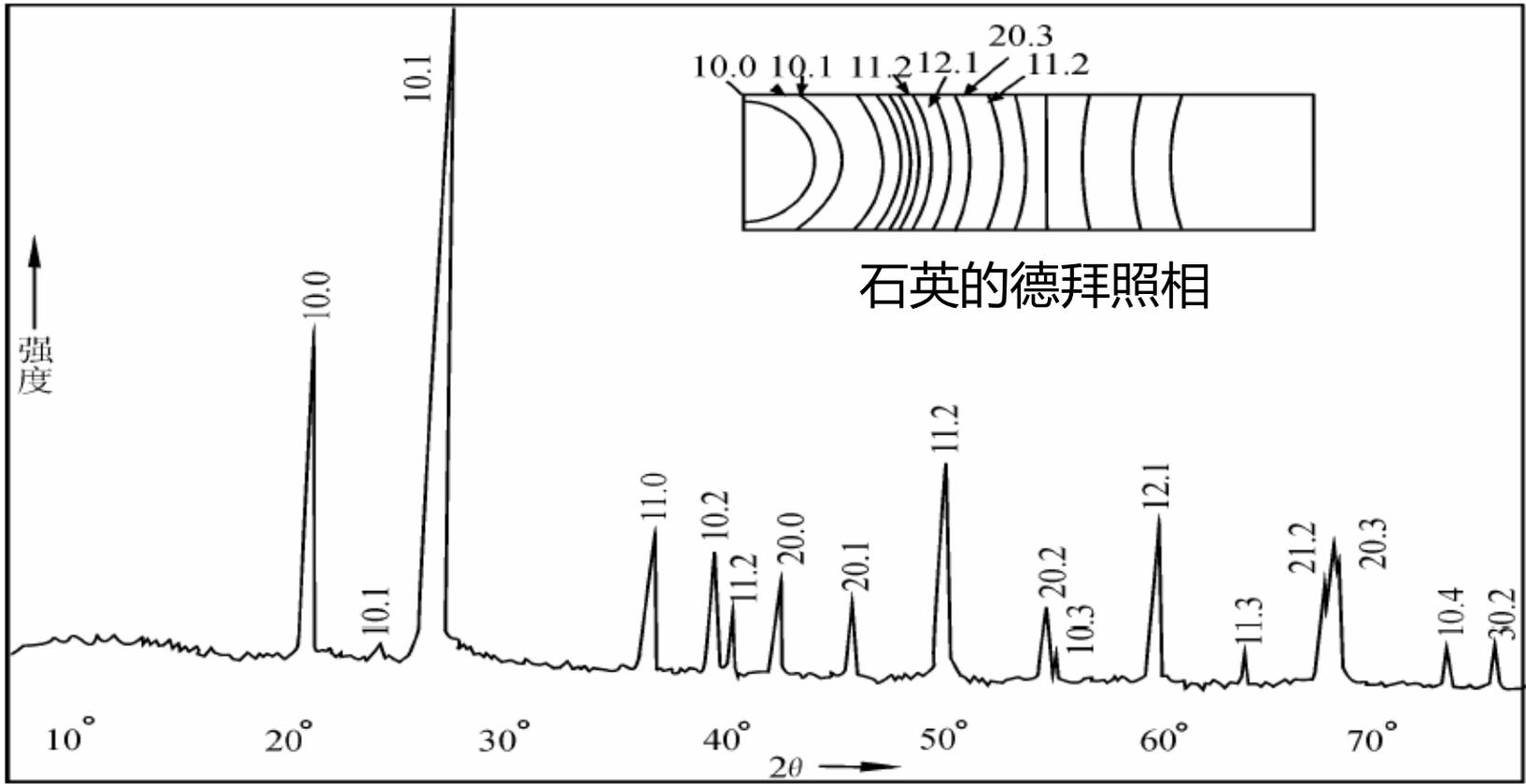
探测器与试样同时转动，角速度为2:1，以确保探测的衍射线与入射线始终保持 2θ 的关系。



5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(3) 衍射仪法



石英的德拜照相

石英的衍射仪计数器记录图

5.3 三维光栅—X射线在晶体上的衍射

劳厄 (M. Von Laue, 1912) 照相和德拜 (Debye) 照相

(3) 衍射仪法

衍射仪与德拜法的区别

- ① 接收X射线方面衍射仪用辐射探测器，德拜法用底片感光；
- ② 其次衍射仪试样是平板状，德拜法试样是细丝；
- ③ 衍射仪法中辐射探测器沿测角仪圆转动，逐一接收衍射；德拜法中底片是同时接收衍射。

光栅的总结

光栅的分类

按照明方式：透射型（平面、三维），反射型（平面）

按调制光波方式：振幅型，相位型，混合型

按结构特点：矩形，正弦型，阶跃型

光栅的特征参数

光栅常数（周期）：相邻栅线的间距，即空间周期的长度，以 d 表示

光栅频率：光栅常数的倒数 $1/d$ ，以 f_0 表示

光栅的关键指标

色散本领：谱线中心分离的程度。

色分辨本领：能够分辨的最小波长。

自由光谱范围：临级光谱不重叠的波长范围。

量程：最大待测波长。

光栅的用途

衍射分光、光通信、显示。。。。

本节重点

1. 光栅的分析方法（理解）
2. 缝间干涉因子和单缝衍射因子各自的作用（理解）
3. 光栅方程的理解和计算（计算）
4. 光栅光谱仪的色散本领、色分辨本领、自由光谱范围（计算）
5. 正弦光栅的特点（理解）
6. 闪耀光栅的两种照明方式（理解）
7. 闪耀光栅的闪耀角及相关计算（计算）
8. X射线衍射的布拉格方程（理解）
9. X射线的劳厄法和德拜法照相（理解）

作业

下册

P16-5

P30-1,3,4

重排版：P264-5, P 275 - 1,3,4

思考题

光栅在实际中还能有哪些用途？为了使其达到最佳性能，使用时又要注意哪些问题？