

二维晶格倒易点阵的实验模拟

刘会玲¹ 牛海波^{1,2} 赵云芳^{1,2} 董伟丽¹ 王月天¹ 石 鲸^{1,2}

(¹ 西安交通大学城市学院, 陕西 西安 710018;

² 光伏技术与系统陕西省高校工程研究中心, 陕西 西安 710018)

摘 要 倒易点阵是物理学中的一个重要概念,但是倒易点阵以及由此延伸出来的倒易空间的概念很难理解。本实验提供一种快速理解和掌握倒易点阵的方法和操作流程。利用金属微球模拟搭建不同对称性的二维晶体结构,改变金属微球的直径模拟二维晶体晶格常数的变化。采用傅里叶变换光路测量二维结构的倒易点阵,模拟倒易点阵与晶格对称性的关系,以及倒易点阵与晶格常数的关系。通过倒易点阵的测量,验证了倒易点阵阵点与晶面间距的数学关系,并对倒易点阵的阵点所代表晶面的晶面指数进行了标定。

关键词 二维晶体结构;晶格常数;傅里叶变换光路;倒易点阵;晶面指数

EXPERIMENTAL SIMULATION OF TWO-DIMENSIONAL LATTICE RECIPROCAL LATTICE

LIU Huiling¹ NIU Haibo^{1,2} ZHAO Yunfang^{1,2} DONG Weili¹ WANG Yuetian¹ SHI Jing^{1,2}

(¹ Xi'an Jiaotong University City College, Xi'an, Shaanxi 710018;

² Engineering Research Center of Photovoltaic Technologies and Systems, Universities of Shaanxi Province, Xi'an, Shaanxi 710018)

Abstract The reciprocal lattice is an important concept in physics, but the concept of reciprocal lattice and the reciprocal space derived from it is difficult to understand. This experiment provides a method and operational process for quickly understanding and mastering reciprocal lattices. Using metal microspheres to simulate the construction of two-dimensional crystal structures with different symmetries, changing the diameter of the metal microspheres to simulate the changes in the lattice constants of the two-dimensional crystal. Using Fourier optical path to measure the reciprocal lattice of two-dimensional structure, simulate the relationship between reciprocal lattice and lattice symmetry, as well as the relationship between reciprocal lattice and lattice constant. By measuring the reciprocal lattice, the mathematical relationship between the reciprocal lattice points and the interplanar spacing was verified, and the interplanar index represented by the reciprocal lattice points was calibrated.

Key words two-dimensional crystal structure; lattice constant; Fourier transform optical path; reciprocal lattice; miller indices

收稿日期: 2024-07-14

基金项目: 陕西省教育科学“十四五”规划 2021 年度课题(SGH21Y0425);西安交通大学城市学院第十一批教学改革研究项目(111005);西安交通大学城市学院第十一批教学改革研究项目(111006);西安交通大学城市学院第二批课程思政专项研究项目(KCSZ02036);西安交通大学城市学院第二批课程思政示范课程和教学团队项目(KCSZSF2306);西安交通大学城市学院 2024 年度校级科研项目(2024Q02);西安交通大学城市学院 2024 年度校级科研项目(2024Q03)。

通信作者: 牛海波, 42457322@qq.com。

引文格式: 刘会玲,牛海波,赵云芳,等. 二维晶格倒易点阵的实验模拟[J]. 物理与工程, 2025, 35(3): 259-269.

Cite this article: LIU H L, NIU H B, ZHAO Y F, et al. Experimental simulation of two-dimensional lattice reciprocal lattice[J]. Physics and Engineering, 2025, 35(3): 259-269. (in Chinese)

晶体是原子(或离子、分子、原子团等)在三维空间内呈周期性规则排列形成的固体,这种三维周期性分布可以概括地用点阵平移对称来描述,因此称这种点阵为晶体点阵(晶格)。倒易点阵是埃瓦尔德在 1921 年建立的,倒易点阵是在晶体点阵(布拉菲格子)的基础上定义的,倒易点阵是晶体点阵的 Fourier 变换,晶体点阵则是倒易点阵的 Fourier 逆变换,倒易点阵和晶体点阵互为倒易点阵^[1,2]。所以,每一种晶体结构,都有两个点阵与其相联系,一个是晶体点阵,反映原子在三维空间做周期排列的图像;另一个是倒易点阵,反映了周期结构物理性质的基本特征。

倒易点阵是物理学中一个重要概念,在固体物理学、半导体物理学领域有着广泛的应用,例如倒易点阵的矢量大小代表不同晶面的面间距,能有效揭示晶体的各向异性。倒易点阵反映晶体的对称性和几何特征,可以用来研究晶体的周期性结构和性质,倒易点阵已成为研究晶体性质的基本工具^[3-5]。然而,倒易点阵以及由此延伸出来的倒易空间的概念与实际空间有较大的区别,因此很难理解。

基于以上原因,设计了本实验。本实验提供的方法和操作流程,有助于初学者快速的理解和掌握倒易点阵这一概念。

1 研究思路

采用金属微球模拟二维晶格的原子排列方式,观察二维晶格的倒易点阵,并计算和标定倒易点阵的阵点。具体思路如下。

1) 搭建具有不同对称性和不同晶格常数的周期结构

将金属微球按照二维晶格的原子排列方式排列在手机玻璃贴膜上,以此来模拟二维晶格的原子排列方式。手机玻璃贴膜具有良好的透光性,在进行光学测量时不会引入额外的干扰,并且手机贴膜的一面有胶水,可以用来固定金属微球,在进行测量时微球不会发生移动。

2) 观察和测量倒易点阵

利用傅里叶变换光路,将设计好载有微球结构的玻璃贴膜固定到载物台上,经调制后的激光束照射样品,采用 CCD 相机接收,通过相机测量软件将晶格的倒易点阵呈现在电脑显示器上。

3) 计算和标定倒易点阵的阵点

用相机测量软件中的像素测量工具测量倒易点阵各阵点与中心斑点之间的距离,根据布拉格公式对倒易点阵进行计算。研究思路图如图 1 所示。

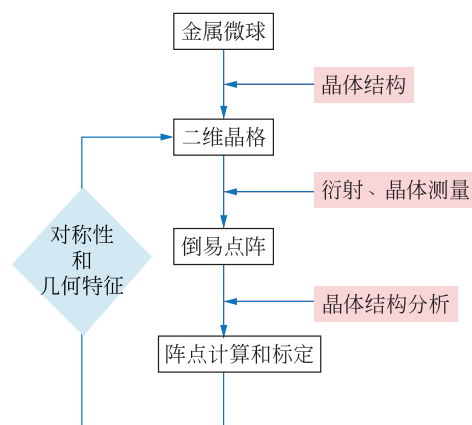


图 1 研究思路图

2 实验原理

2.1 二维晶格

晶体是由重复的基本单元(原子、分子或离子)按照一定的规律排列而成的固体。晶体的结构可以用晶格来描述,晶格是由重复的最小单元(晶胞)构成的几何图形。晶格可以分为不同的维度,一维晶格是由一条直线上的点组成,二维晶格是由一个平面上的点组成,三维晶格是由一个空间上的点组成。二维晶格是三维晶格的一个特殊情况,二维晶格包括四个晶系(斜交晶系、矩形晶系、正方晶系和六角晶系),五种布拉菲格子和十七个平面群。它有助于理解晶体的对称性、布拉格衍射、能带理论等重要概念。二维晶格可以用两个互相不平行的基矢 a 和 b 来表示,基矢是指能够表示所有晶胞位置的最小向量,即单位矢量,是由晶胞原点指向原子的矢量^[6-7]。晶胞是晶体结构的最小单位,形象的称为格子,能够体现出整个晶体结构的特征,也称布拉菲晶胞或布拉菲格子,又称单胞。任意一个晶胞的位置可以用基矢的整数倍来表示,即 $R = ma + nb$,其中 n 和 m 是整数。根据对称性,二维晶格的布拉菲格子有五种基本类型,五种类型的二维布拉菲格子图如图 2 所示,分别是正方形(square)如图 2(a)所示、长方

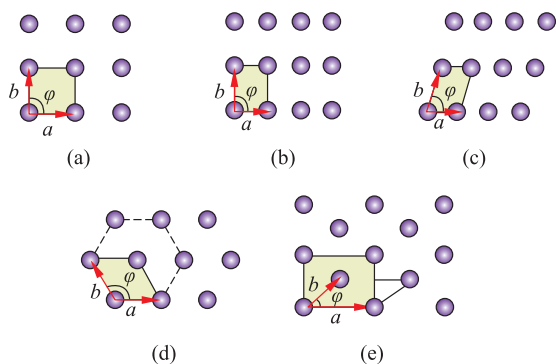


图2 五种类型的二维布拉菲格子图

(a) 正方形; (b) 长方形; (c) 菱形; (d) 六角形; (e) 斜方形

形(rectangular)如图2(b)所示、菱形(rhombic)如图2(c)所示、六角形(hexagonal)如图2(d)所示和斜方形(oblique)如图2(e)所示。

这五种类型的二维晶格可以用两个参数来区分,即基矢之间的夹角(基矢夹角)和基矢之比(基矢比),五种类型的二维布拉菲格子参数及倒易点阵特征如表1所示。

表1 五种类型的二维布拉菲格子参数及倒易点阵特征

晶格类型	倒易点阵	基矢夹角	倒易基矢夹角	基矢比	倒易基矢比
正方形	正方形	90°	90°	1	1
长方形	长方形	90°	90°	≠1	≠1
菱形	菱形	≠90°	≠90°	1	1
六角形	六角形	60°/ 120°	60°/ 120°	1	1
斜方形	斜方形	≠90°	≠90°	≠1	≠1

这五种类型的二维晶格中,正方晶格是最简单的二维晶格,也是最易于理解的类型之一,研究正方形晶格的倒易点阵有助于对其他二维晶格倒易点阵的理解。六角晶格是最常见的二维晶格,具有很好的六重对称性,这种结构在固体物理学中非常重要,因为它与许多材料的电子结构有关。例如石墨烯就是一种典型的二维六角晶格结构,由于其优异的电学和热学性能,在电子器件、传感器等领域有重要应用^[8]。

所以,本实验选择对二维正方晶格和二维六角晶格这两种晶格的倒易点阵进行研究。

2.2 倒易点阵

倒易点阵是一种晶体学表达方法,能巧妙、正确的反映出晶体点阵周期性的物理本质。倒易点

阵中的每一个阵点都对应着实际晶格中的一个晶面。倒易点阵中阵点分布的对称性及间距,既能反映晶面的取向,又能反映晶面间距^[9-11]。对于二维晶格的倒易点阵,其基矢可以通过晶格的基矢计算得到^[6,7]:

$$a^* = \frac{b \times n}{|a \times b|} \quad b^* = \frac{n \times a}{|a \times b|} \quad (1)$$

二维晶格的倒易空间可以在倒易点阵基矢的基础上平移构成:

$$G = ha^* + kb^* \quad (2)$$

其中 n 和 m 是整数。二维晶格基矢与其倒易点阵的基矢之间满足关系式:

$$a \cdot a^* = b \cdot b^* = 1 \quad a \cdot b^* = b \cdot a^* = 0 \quad (3)$$

二维菱形晶格的晶格基矢与其倒易点阵的基矢的关系图如图3所示,图3(a)为二维菱形晶格,图3(b)为二维菱形晶格的倒易点阵。

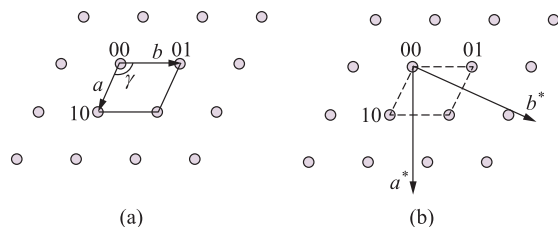


图3 二维菱形晶格的晶格基矢与其倒易点阵的基矢的关系图

(a) 二维菱形晶格; (b) 二维菱形晶格的倒易点阵

3 实验研究

3.1 二维晶格结构搭建

二维晶格结构搭建材料:金属微球(1mm 和 0.6mm)、玻璃手机贴膜、放大镜等。

实验中采用1mm 和 0.6mm 两种不同直径的微球,根据二维晶格的原子排列方式,将微球有序的排列在玻璃手机贴膜有胶水的一侧,以此来模拟构建二维晶体的晶格,用金属微球模拟二维晶格图如图4所示,金属微球如图4(a)所示,用金属微球有序排列模拟二维晶格如图4(b)所示。

3.2 实验装置及搭建与调节

3.2.1 实验装置及元器件介绍

实验测量装置如图5(a)所示,各光学元器件从左向右的次序如图5(b),依次为固体激光器(532nm)、光衰减器、空间滤波器、光阑、凸透镜($f=100\text{mm}$)、变换透镜($f=200\text{mm}$)、CCD 数字相机

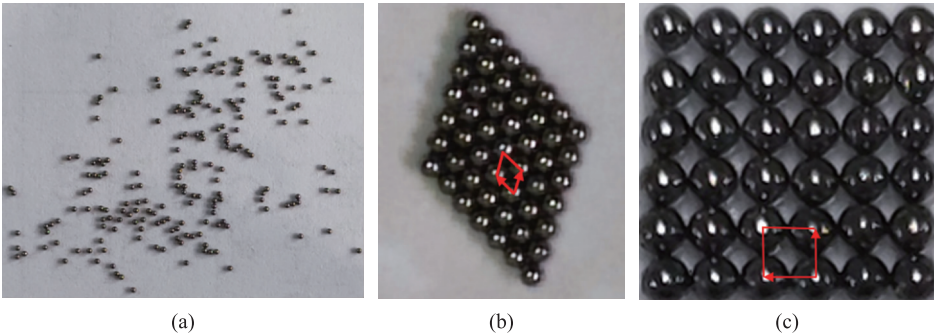


图 4 用金属微球模拟二维晶格图

(a) 金属微球；(b) 用金属微球有序排列模拟二维晶格图(灰线标表示周期性的晶格结构单元)

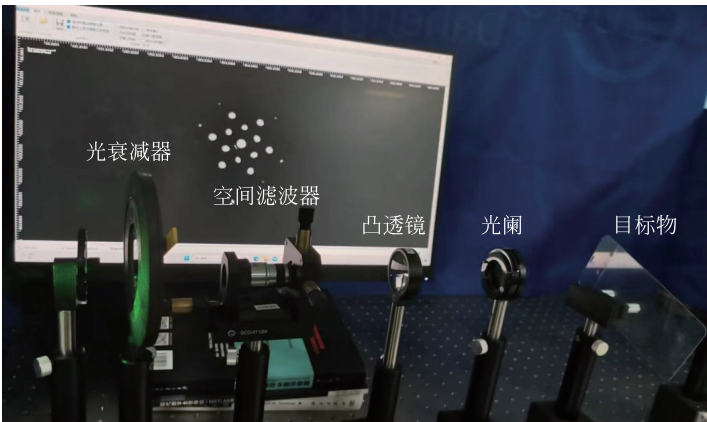
及测量软件等。各元器件的功能介绍如下。

- (1) 固体激光器: 为实验提供(532nm)激光光源。
- (2) 圆形可调衰减器: 可削弱激光光强。
- (3) 空间滤波器: 可去除图像中的高阶模和噪声、提高激光质量。
- (4) 焦距 100mm 的准直凸透镜: 可将空间滤波器中出来的光束转变为平行光。
- (5) 光阑: 控制光束大小, 使其覆盖在目标物上。
- (6) 目标物: 光线经过目标物发生衍射现象。
- (7) 焦距 200mm 的变换透镜: 可将经过目标物的衍射光线会聚。
- (8) CCD 数字相机及测量软件: 当相机靶面处于变换透镜后焦面上时, 相机与电脑相连, 通过运行相机测量软件, 即可观察到衍射图样。

3.2.2 实验装置的搭建与调节

实验装置的搭建与调节步骤如下。

- (1) 组件组装: 依次组装各个组件, 以便后续的装置调节与测量环节。
- (2) 根据实验装置图图 5, 从左向右依次摆放元器件到对应位置, 分别为: 激光器、圆形可调衰减器、空间滤波器、焦距 100mm 的准直透镜、目标物, 焦距 200mm 的变换透镜和 CCD 数字像机。其中: 空间滤波器应放置于准直镜前焦面, 100mm 附近处(一般是空间滤波器针孔位置到准直镜的距离为 100mm), 目标物放置于变换透镜透镜前焦面 200mm 处, 数字摄像机靶面应放置于变换透镜的透镜后焦面, 即 200mm 附近处。
- (3) 调整各元件的左右和上下位置, 粗调使所有元件同轴等高。
- (4) 粗调完成后, 打开激光器光源。注意: 实



(a)



(b)

图 5 傅里叶变换光路实验装置图

(a) 实验装置图；(b) 光学元器件次序

验过程应避免双眼直视激光光路,必要时戴上激光防护镜。

(5) 调整激光器水平:借助可变光阑,光阑放在激光器的近处和远处,分别调节光阑高低和激光器的水平俯仰,使光斑通过光阑,反复 2 次,可将激光器调平,最终使激光束与光学平台平行。

(6) 调整空间滤波器:使空间滤波器物镜出射的光斑打在光阑中间,然后安装 25 μm 针孔,调整空间滤波器的三维旋钮使物镜的聚焦光斑与小孔重合,达到滤波效果。

(7) 调整焦距为 100mm 的准直凸透镜:调整准直镜的高低使出射光入射到光阑中间,前后移动准直透镜,观察光斑大小,远处近处光斑大小不变,即可认为调整完成。

(8) 调整目标物:将目标物放置在准直透镜后方,调整光阑大小约 10mm 入射目标图案。

(9) 调整焦距为 200mm 的变换透镜:将变换透镜放置在目标物后面,调整透镜位置使入射光斑入射透镜中心。

(10) 调整数字相机:调整相机位置使入射光打在相机靶面中间,当相机靶面处在透镜后焦面时就可以观察到目标物的倒易点阵,进行相应的光学测量。

3.3 光学测量系统常数 L 的测量

倒易点阵阵点距离与晶格晶面间距之间的关系公式: $rd = L\lambda$,即衍射公式,其中含有未知参数 L ,该参数与所搭建的光学系统有关,此外,倒易点阵呈现在电脑显示器上通常是以像素为单位进行测量的。为了在后续实验中利用衍射公式进行计算,首先需要得到与光学测量系统对应的常数 L 数值。

利用已经搭建好的傅里叶变换光路,测量多个已知参数的光栅,然后对光栅测量结果进行拟合,计算出常数 L 。具体如下:

首先,将衍射公式: $rd = L\lambda$,进行变形得到公式: $\frac{1}{L\lambda}d = \frac{1}{r}$,其中 r 为衍射斑点在电脑显示器上的间距(单位:像素), d 为所用光栅的光栅常数, L 为光学系统的相机常数, λ 为测量所用激光光源的波长(532nm)。

然后,基于公式: $\frac{1}{L\lambda}d = \frac{1}{r}$,通过最小二乘法拟合出了 $\frac{1}{L\lambda}$ 的数值, $\frac{1}{L\lambda}$ 的数据拟合图如图 6

所示。

最后,计算出本实验所采用光学系统的 $L = 0.0391$ 。

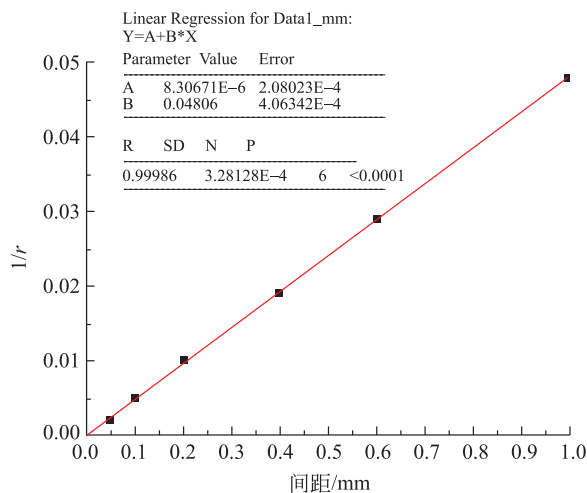


图 6 $\frac{1}{L\lambda}$ 的数据拟合图

3.4 倒易点阵的测量

将贴有二维晶格结构的手机玻璃贴膜固定在载物台上,并进行测量。

测量时注意对光衰减器进行调节,以控制入射光的强度,避免对基底造成不必要的干扰。同时对光阑的大小进行调节,直至从显示器上观察到清晰的倒易点阵斑点,倒易点阵实验测量图如图 7。

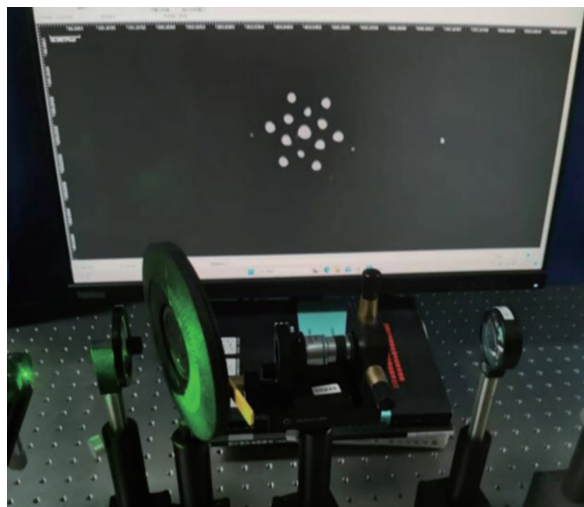


图 7 倒易点阵实验测量图

3.5 倒易点阵的计算和标定

倒易点阵中的每一个格点都对应晶格的一个

的金属微球模拟的二维正方晶格在 532nm 波长的激光照射下形成的倒易点阵,直径 1mm 的微球模拟的正方晶格的倒易点阵图如图 10 所示、直径 0.6mm 的微球模拟的正方晶格的倒易点阵图如图 11 所示。测量得到的距离关系和角度关系如表 2~表 5 所示,倒易点阵中,中心格点与 4 个等价的最近邻格点之间的距离如表 2 所示,最近邻格点围绕中心格点的夹角如表 3 所示,中心格点与 4 个等价的次近邻格点之间的距离如表 4 所示,次近邻格点围绕中心格点的夹角如表 5 所示。

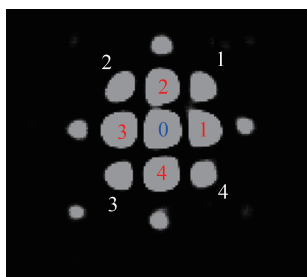


图 10 直径 1mm 的微球模拟的正方晶格的倒易点阵图

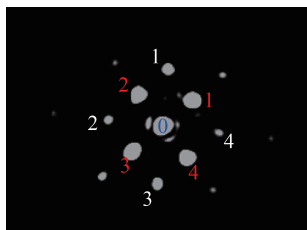


图 11 直径 0.6mm 的微球模拟的正方晶格的倒易点阵图

表 2 倒易点阵中,中心格点与 4 个等价的最近邻格点之间的距离(单位:像素)

	1mm	0.6mm
1	20	34
2	20	35
3	20	34
4	21	35

表 3 倒易点阵中,最近邻格点围绕中心格点的夹角(单位:度)

	1mm	0.6mm
$\angle 102$	89.8	92.3
$\angle 203$	89.5	89.8
$\angle 304$	90.0	91.8
$\angle 401$	89.3	90.5

表 4 倒易点阵中,中心格点与 4 个等价的次近邻格点之间的距离(单位:像素)

	1mm	0.6mm
1	29	49
2	28	48
3	28	50
4	28	49

表 5 倒易点阵中,次近邻格点围绕中心格点的夹角(单位:度)

	1mm	0.6mm
$\angle 102$	91.6	89.8
$\angle 203$	89.9	90.4
$\angle 304$	88.5	91.8
$\angle 401$	89.7	89.0

从测量数据可以看出,二维正方晶格的倒易点阵呈现出与二维正方晶格相同的四重对称性,并且 0.6mm 微球晶格的倒易点阵,阵点之间的距离明显大于 1mm 微球晶格的倒易点阵阵点距离,体现出晶格常数越小的晶格,其倒易点阵的阵点间距越大的特征。

4.2 二维六方晶格的倒易点阵

通过实验观察和测量了用直径 1mm 和 0.6mm 金属微球模拟的二维六角晶格在 532nm 波长的激光照射下形成的倒易点阵,直径 1mm 的微球模拟的六角晶格的倒易点阵图如图 12、直径 0.6mm 的微球模拟的六角晶格的倒易点阵图如图 13 所示。测量得到的距离关系和角度关系列于表 6~表 9 中。倒易点阵中,中心格点与 6 个等价的最近邻格点之间的距离如表 6 所示,最近邻格点围绕中心格点的夹角如表 7 所示,中心格点与 6 个等价的次近邻格点之间的距离如表 8 所示,倒易点阵中,次近邻格点围绕中心格点的夹角如表 9 所示。

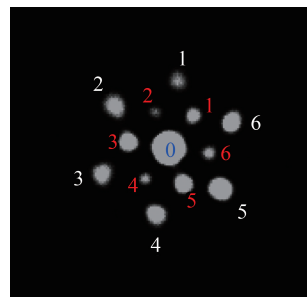


图 12 直径 1mm 的微球模拟的六角晶格的倒易点阵图

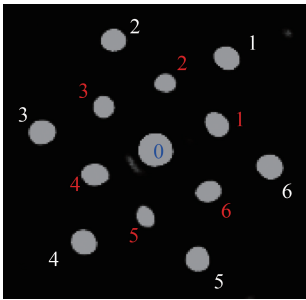


图 13 直径 0.6mm 的微球模拟的六角晶格的倒易点阵图

表 6 倒易点阵中,中心格点与 6 个等价的最近邻格点之间的距离(单位:像素)

	1mm	0.6mm
1	24	40
2	23	39
3	25	40
4	24	38
5	24	41
6	23	40

表 7 倒易点阵中,最近邻格点围绕中心格点的夹角(单位:度)

	1mm	0.6mm
$\angle 102$	61.7	57.8
$\angle 203$	61.3	60.5
$\angle 304$	62.1	59.4
$\angle 405$	59.3	58.1
$\angle 506$	61.6	60.4
$\angle 601$	60.7	62.3

表 8 倒易点阵中,中心格点与 6 个等价的次近邻格点之间的距离(单位:像素)

	1mm	0.6mm
1	40	69
2	39	68
3	40	68
4	40	68
5	41	70
6	40	68

表 9 倒易点阵中,次近邻格点围绕中心格点的夹角(单位:度)

	1mm	0.6mm
$\angle 102$	59.8	59.3
$\angle 203$	59.7	60.2

续表

	1mm	0.6mm
$\angle 304$	59.5	60.4
$\angle 405$	58.2	58.7
$\angle 506$	61.9	61.2
$\angle 601$	62.1	59.2

从测量数据可以看出,二维六角晶格的倒易点阵呈现出与二维六角晶格相同的六重对称性,并且 0.6mm 微球晶格的倒易点阵,阵点之间的距离明显大于 1mm 微球晶格的倒易点阵阵点距离,表现出晶格常数越小的晶格,其倒易点阵阵点的间距越大的特征。

4.3 倒易点阵的标定

倒易点阵的对称性与实际晶格的对称性是一致的,倒易点阵中的每一阵点对应着实际晶格中的一个晶面。倒易点阵阵点与中心阵点的距离反映了该晶面对应的晶面间距,二者通过布拉格公式联系起来。通过计算对直径 0.6mm 微球构建的正方晶格和六角晶格形成的倒易点阵的各个阵点所对应的晶面进行了标定,并根据衍射公式: $rd=L\lambda$ 对晶面间距进行了计算。

4.3.1 二维正方晶格倒易点阵的计算与标定

对于二维正方晶格,中心格点最近邻的格点对应的是晶格的 $\{100\}$ 晶面族,该晶面族包含四个等价的晶面,晶面指数分别为: (100) , (010) , (-100) 和 $(0-10)$,正方晶格倒易点阵中心格点最近邻格点的标定图如图 14 所示。在图 14 中对倒易点阵上表示这四个晶面的格点进行了标定。并对相应晶面的晶面间距进行了计算,由倒易点阵计算得到的 $\{100\}$ 晶面族各晶面间距如表 10 所示,表 10 中的理论值为根据几何关系计算得到的结果。

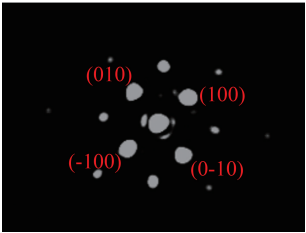


图 14 正方晶格倒易点阵中心格点最近邻格点的标定图

二维正方晶格的倒易点阵中,中心格点次近邻格点对应的是晶格的 $\{110\}$ 晶面族,该晶面族包

表 10 由倒易点阵计算得到的 $\{100\}$ 晶面族各晶面间距(单位:mm)

晶面	晶面间距/mm
(100)	0.612
(010)	0.594
(-100)	0.612
(0-10)	0.594
理论值	0.600

含四个等价的晶面,晶面指数分别为:(110),(-110),(-1-10)和(1-10),正方晶格倒易点阵中心格点次近邻格点的标定图如图 15 所示。在图 15 中对倒易点阵上表示这四个晶面的格点进行了标定,还对相应晶面的晶面间距进行了计算,由倒易点阵计算得到的 $\{110\}$ 晶面族各晶面间距如表 11 所示,表 11 中的理论值为根据几何关系计算得到的结果。

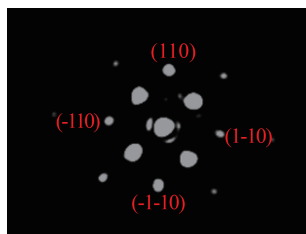


图 15 正方晶格倒易点阵中心格点次近邻格点的标定图

表 11 由倒易点阵计算得到的 $\{110\}$ 晶面族各晶面间距(单位:mm)

晶面	晶面间距/mm
(110)	0.425
(-110)	0.433
(-1-10)	0.416
(1-10)	0.425
理论值	0.424

4.3.2 二维六角晶格倒易点阵的计算与标定

对于二维六角晶格的倒易点阵,中心格点最近邻的格点对应的是晶格的 $\{10-10\}$ 晶面族。该晶面族包含六个等价的晶面,晶面指数分别为:(10-10),(01-10),(-1100),(-1010),(0-110)和(1-100),六角晶格倒易点阵中心格点最近邻格点的标定图如图 16 所示。在图 16 中对倒易点阵上表示这六个晶面的格点进行了标定,由倒易点阵计算得到的 $\{10-10\}$ 晶面族各晶面间距如表 12 所示。

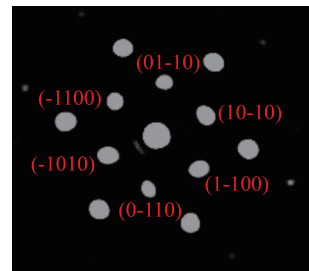


图 16 六角晶格倒易点阵中心格点最近邻格点的标定图

表 12 由倒易点阵计算得到的 $\{10-10\}$ 晶面族各晶面间距(单位:mm)

晶面	晶面间距/mm
(1010)	0.520
(01-10)	0.533
(-1100)	0.520
(-1010)	0.547
(0-110)	0.520
(1-100)	0.507
理论值	0.520

二维六角晶格的倒易点阵中,中心格点的次近邻格点对应的是 $\{11-20\}$ 晶面族。 $\{11-20\}$ 晶面族所包含的六个晶面的晶面指数分别为:(11-20),(-12-10),(-2110),(-1-120),(1-210)和(2-1-10),六角晶格倒易点阵中心格点次近邻格点的标定图如图 17 所示。在图 17 中对倒易点阵上表示这四个晶面的格点进行了标定,由倒易点阵计算得到的 $\{11-20\}$ 晶面族各晶面间距如表 13 所示。

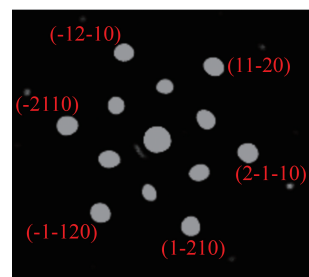


图 17 六角晶格倒易点阵中心格点次近邻格点的标定图

表 13 由倒易点阵计算得到的 $\{11-20\}$ 晶面族各晶面间距(单位:mm)

晶面	晶面间距/mm
(11-20)	0.301
(-12-10)	0.306

续表

晶面	晶面间距/mm
(-2110)	0.306
(-1-120)	0.306
(1-210)	0.297
(2-1-10)	0.306
理论值	0.300

5 误差计算与分析

5.1 误差来源

相较于激光波长(532nm),微球的尺寸较大(1mm和0.6mm),所以最终实验测得的倒易点阵的光斑有一定的尺寸,因此精确找到光斑中心点存在误差,导致测量光斑之间距离存在误差。

5.2 误差计算

为了评估本实验方法的准确性和可靠性,本文将实验测量值与根据倒格子公式计算得到的理论值进行了对比,并进行了误差分析。分别采用相对误差

计算公式: $E=\frac{|d_{\text{平均值}}-d_{\text{理论值}}|}{d_{\text{理论值}}}\times 100\%$,以及不确

定度计算公式: $s(\bar{d})=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (d_i-d_{\text{平均值}})^2}{n(n-1)}}$,对

晶面间距结果进行了误差计算,晶面间距结果的误差计算如表14所示,由表14的结果可以看出,实验值与理论值符合的很好,表明该实验具有较高的精度。

5.3 误差来源及提高测量精度的方案

在测量倒易点阵光斑之间距离的时候,起始点和终止点都要选择光斑的中心位置。倒易点阵中处于等价位置的格点对应的是晶格的同一个晶面族,这些等价格点与中心格点的间距都是相等的,因此可以通过多次测量取平均值的方法来减

小测量误差。

利用光衰减器,尽量减小入射激光的强度,消除干扰。调节光阑的大小,使得激光光斑尺寸尽可能小,并照射到晶格合适的区域,提高成像效果。最终获得清晰、分立的倒易点阵图像。

5.4 实验改进与拓展

在以上实验方法和实验仪器的基础上,该实验还可以进行如下改进和拓展:

(1) 本实验采用532nm绿色激光器,根据衍射公式: $rd=L\lambda$,可通过提高激光器的波长(如采用650nm的红光激光器)和减小微球的直径,均有助于提高实验精度。

(2) 采用不同直径的微球模拟晶格中存在缺陷的情况下(如空位或者间隙原子的情况),晶格倒易点阵的变形情况。

(3) 观察两种甚至多种相结构共存时(比如四方晶格和六角晶格共存),形成的复相的晶格倒易点阵。

(4) 模拟并观察原子在无序排列情况下对应的环形倒易点阵。

6 结语

本文针对固体物理和晶体物理教学中的倒易点阵这一教学难点,通过直观的方法,巧妙的构思,简单的器材,高精度的测量,展示了倒易点阵和晶格点阵之间的物理关系,旨在解决固体物理和晶体学教学过程中学生关于倒易点阵抽象概念理解困难的问题。实验方法简便、精度高且拓展性强,可以加深学生对倒易点阵概念的理解,熟悉倒易点阵与晶体对称性、晶体晶格常数、晶面指数之间的关系。该实验的方法有助于启发学生思维,加强学生对抽象概念的深刻理解,在培养学生理论与实践相结合解决问题的基本技能和创新能力方面,有着重要的教学示范作用。

表 14 晶面间距结果的误差计算

晶格类型	晶面	平均值/mm	理论值/mm	相对误差/%	不确定度/mm
正方晶格	{100}晶面族	0.603	0.600	0.50	0.006
	{110}晶面族	0.425	0.424	0.24	0.005
六角晶格	{10-10}晶面族	0.524	0.520	0.77	0.006
	{11-20}晶面族	0.304	0.300	1.3	0.002

参 考 文 献

- [1] 闫守胜. 固体物理基础[M]. 北京:北京大学出版社, 2011.
YAN S S. Solid state physics[M]. Beijing: Peking University Press, 2011. (in Chinese)
- [2] 江向平,江惠民. 倒易点阵的引入[J]. 景德镇陶瓷学院学报,1995,16(C1): 39-44.
JIANG X P, JIANG H M. Introduction of reciprocal lattice [J]. Journal of Ceramics, 1995, 16 (C1): 39-44. (in Chinese)
- [3] 基泰尔. 固体物理导论[M]. 化学工业出版社, 2005.
Charles Kittel. Introduction to solid state physics [M]. Chemical Industry Press, 2005. (in Chinese)
- [4] 黄昆,韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京:高等教育出版社, 2005.
HUANG K, HAN R Q. Solid state physics[M]. Beijing: Higher Education Press, 2005. (in Chinese)
- [5] 陈惠芬, 刘克家, 陈锟. 材料科学中倒易点阵的理解与来源和解释[J]. 科技信息,2011(18):518-519.
CHEN H F, LIU K J, CHEN K. Understanding, sources, and explanations of reciprocal lattices in materials science [J]. Science & Technology Information, 2011 (18): 518-519. (in Chinese)
- [6] TILLEY R J D. Crystals and crystal structures[M]. New York: John Wiley & Sons Inc. 2006.
- [7] 申诚. 二维晶体的一些晶体学问题研究[J]. 长沙电力学院学报(自然科学版),2004, 19(3):87-90.
SHEN C. Research on some crystallographic problems of two dimensional crystals[J]. Journal of Changsha University of Electric Power (Natural Science), 2004, 19(3): 87-90. (in Chinese)
- [8] 黄桂芹. 二维材料的前沿进展在固体物理教学中的渗透[J]. 大学物理,2021,40(9):1-4.
HUANG G Q. The penetration of cutting-edge advances in two-dimensional materials into solid-state physics teaching [J]. College Physics, 2021, 40(9): 1-4. (in Chinese)
- [9] 朱林伟,洪正平,国承山. 二维阵列光场衍射自成像效应的倒格矢分析[J]. 光子学报,2008,37(5):977-982.
ZHU L W, HONG Z P, GUO C S. Inverted lattice analysis of self imaging effect of two-dimensional array light field diffraction[J]. ACTA PHOTONICA SINICA, 2008, 37(5): 977-982. (in Chinese)
- [10] 王莉. 正点阵与倒易点阵中的对应关系[J]. 唐山师范学院学报,2004,26(5):15-16.
WANG L. The correspondence between regular and reciprocal lattices[J]. Journal of Tangshan Teachers College, 2004, 26(5): 15-16. (in Chinese)
- [11] 陈难先. 倒易点阵与晶面指数的关系[J]. 大学物理,2011, 30(2):50-52.
CHEN N X. The relationship between reciprocal lattice and crystal facet index[J]. College Physics, 2011, 30(2): 50-52. (in Chinese)
- [12] 申诚. 二维晶体的衍射及其倒易点阵的物理内容[J]. 长沙电力学院学报(自然科学版),2005,73-75,80.
SHEN C. The diffraction of two-dimensional crystals and the physical content of their reciprocal lattice[J]. Journal of Changsha University of Electric Power (Natural Science), 2005: 73-75, 80. (in Chinese)
- [13] 黄冰心,强文江. X射线衍射和倒易点阵[J]. 大学物理, 2023,42(4): 4-12,33.
HUANG B X, QIANG W J. X-ray diffraction and reciprocal lattice[J]. College Physics, 2023, 42(4): 4-12, 33. (in Chinese)
- [14] 周玉. 材料分析方法[M]. 北京:机械工业出版社, 2011.
ZHOU Y. Material analysis methods[M]. Beijing: China Machine Press, 2011. (in Chinese)
- [15] 刘智恩. 材料科学基础[M]. 西安:西北工业大学出版社, 2003.
LIU Z E. Foundation of material science [M]. Xi'an: Northwestern Polytechnic University Press, 2003. (in Chinese)
- [16] 胡赓祥,蔡珣,戎咏华. 材料科学基础[M]. 上海:上海交通大学出版社, 2010.
HU G X, CAI X, RONG Y H. Foundation of material science[M]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010. (in Chinese)