



# 晶体学实验

## ——2020年国际物理奥林匹克竞赛实验试题解答

惠王伟 宋峰

(南开大学物理科学学院 300071)

2020年国际物理奥林匹克竞赛实验试题为“晶体学”，试题分为四个部分，A部分主要研究一维晶体衍射的最基本规律，B部分研究二维晶体的相关参数，C部分研究晶体中的晶胞对称性，D部分研究相位问题。本文在大赛提供的参考答案基础上对本题进行了重新解答。

### A部分：从狭缝到晶体(5.0分)

#### A.1(0.3分)

题目中提供了散射矢量 $q$ 表达式

$$q = 2k_i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{A1})$$

式中，波矢为 $\vec{k}_i$  ( $|\vec{k}_i| = 2\pi/\lambda$ ) $\lambda$ 为波长， $\theta$ 为衍射角，可认为其远小于1(题给条件)，

$$\text{则 } q \approx k_i \theta = \frac{2\pi}{\lambda} \theta \quad (\text{A2})$$

所以 $q \ll k_i$

题目中也给出了光强 $I$ 取决于光衍射角 $\theta$ 的公式[原文中为公式(4)，本文中重新编号为(A3)]

$$I(\theta) = \frac{I_0}{N^2} \left( \frac{\sin\left(\frac{N\pi a \sin \theta}{\lambda}\right)}{\sin\left(\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}\right)} \right)^2 \left( \frac{\sin\left(\frac{\pi b \sin \theta}{\lambda}\right)}{\left(\frac{\pi b \sin \theta}{\lambda}\right)} \right)^2 \quad (\text{A3})$$

式中， $I_0$ 是 $\theta=0$ 时的光强， $N$ 是光栅狭缝数。

在 $\theta$ 很小时，

$$I(\theta) \approx \frac{I_0}{N^2} \left( \frac{\sin\left(\frac{N\pi a \theta}{\lambda}\right)}{\sin\left(\frac{\pi a \theta}{\lambda}\right)} \right)^2 \left( \frac{\sin\left(\frac{\pi b \theta}{\lambda}\right)}{\left(\frac{\pi b \theta}{\lambda}\right)} \right)^2 \quad (\text{A4})$$

将(A2)代入(A4)，可得 $I(\theta)$ 表达式为：

$$I = \frac{I_0}{N^2} \left( \frac{\sin(Nqa/2)}{\sin(qa/2)} \right)^2 \left( \frac{\sin(qb/2)}{(qb/2)} \right)^2 \quad (\text{A5})$$

#### A.2(0.2分)

对于光栅常量为 $a$ 的衍射光栅，光栅衍射方程为

$$a \sin \theta = h\lambda, h \in Z \quad (\text{A6})$$

小角度近似，有 $a\theta = h\lambda$  (A7)

将(A7)代入(A2)，可以得到第 $h$ 个衍射极大的散射矢量表达式为：

$$q = \frac{2\pi}{a} h, \quad (\text{A8})$$

#### A.3(0.2分)

利用式(A8)，可以推出：

$$q = q_1 h, h \in Z \quad (\text{A9})$$

$$q_1 a = 2\pi \quad (\text{A10})$$

$q_1$ 是1级衍射极大的散射矢量。

#### A.4(1.0分)

利用题目中提供的实验器材，搭建实验装置，利用激光器照射样品，分析观察屏上的衍射光斑。由于衍射角 $\theta$ 可认为其远小于1(题给条件)，利用A9和A10可以得到：

$$q_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{S_N}{NL} \quad (\text{A11})$$

其中 $S_N$ 为0级衍射极大到 $N$ 级衍射极大的距离， $L$ 为样品DG到观察屏的距离。利用公式A10

和A11,通过测量 $S_0$ 和 $L$ 可以得到:

$$\text{DG1: } q_1 = 320 \pm 32 \text{mm}^{-1}, a = 20 \pm 2 \mu\text{m}$$

$$\text{DG2: } q_1 = 130 \pm 13 \text{mm}^{-1}, a = 50 \pm 5 \mu\text{m}$$

$$\text{DG3: } q_1 = 79 \pm 8 \text{mm}^{-1}, a = 80 \pm 8 \mu\text{m}$$

$$\text{DG4: } q_1 = 79 \pm 8 \text{mm}^{-1}, a = 80 \pm 8 \mu\text{m}$$

$$\text{DG5: } q_1 = 79 \pm 8 \text{mm}^{-1}, a = 80 \pm 8 \mu\text{m}$$

### A.5(1.5分)

利用A.1得到的公式A5可以推出:

$$I(h) = I_0 \left[ \frac{\sin(\pi b h / a)}{\pi b h / a} \right]^2 \quad (\text{A12})$$

$I$ 的极大值取决于 $h$ ,通过测量两个不同的衍射极大值(如第1级和第2级)可以得到:

$$\frac{\pi b}{a} = \arcsin \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{I(1)}{I(2)}} \sin(2\pi b/a) \right) \quad (\text{A13})$$

其中 $I(1)$ 和 $I(2)$ 为第1级和第2级衍射极大的光强,通过实验测得,将其测量值带入A13,可以求出 $a/b$ ,结果如下:

$$\text{DG1: } a/b = 2$$

$$\text{DG2: } a/b = 4$$

$$\text{DG3: } a/b \in [7, 10]$$

$$\text{DG4: } a/b \in [3.2, 4.8]$$

$$\text{DG5: } a/b \in [1.5, 2.5]$$

### A.6(0.7分)

题目中提供了结构因子的表达式:

$$F(q) \sim \int \rho(x) \exp(iqx) dx \quad (\text{A14})$$

通过题目中给出的图1可以直接得到 $\rho(x)$ 的表达式:

$$\rho(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, b) \\ 0, & x \in [b, a) \end{cases} \quad (\text{A15})$$

将 $\rho(x)$ 代入结构因子的表达式中可以得到:

$$F_A(h) = 2 \cdot \frac{\sin(\pi h/p)}{q_{1h}} \cdot e^{i\pi h/p} = \begin{cases} \frac{2\pi}{q_1} \cdot \left( \frac{1}{p} \right), & h = 0 \\ F_1(h), & h \neq 0 \end{cases} \quad (\text{A16})$$

式中 $p = a/b$ ,强度为0的极大 $h$ 满足:  
 $h = \pm pm, m \in N$

### A.7(0.7分)

采用A.6同样的方法可以得到图1中晶胞B的 $\rho(x)$ 的表达式:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, b) \\ 1, & x \in [b, a) \end{cases} \quad (\text{A17})$$

同样可以得到晶胞B的结构因子 $F_B(h)$ :

$$F_B(h) = 2 \cdot \frac{\sin(\pi h)}{q_{1h}} \cdot e^{i\pi h} - 2 \cdot \frac{\sin(\pi h/p)}{q_{1h}} \cdot e^{i\pi h/p} \\ = \begin{cases} \frac{2\pi}{q_1} \cdot \left( 1 - \frac{1}{p} \right), & h = 0 \\ -F_1(h), & h \neq 0 \end{cases} \quad (\text{A18})$$

强度为0的极大 $h$ 满足: $h = \pm pm, m \in N$

### A.8(0.4分)

用同样的光照射图1中的两个光栅,利用公式A16和A18可以得到光强之比为:

$$\frac{I_{A,h=0}}{I_{B,h=0}} = \left( \frac{b}{a-b} \right)^2 = \left( \frac{1}{p-1} \right)^2, \frac{I_{A,h=1}}{I_{B,h=1}} = 1 \quad (\text{A19})$$

## A部分评述

A部分主要研究的是一维晶体衍射的最基本规律。本题通过观察衍射光栅的衍射现象,研究一维晶体的相关参数。题中涉及的实验操作并不复杂,但有较多的公式推导和计算,且后面题目中经常要用到前面题目的结果,如果前面题目出现错误就会导致后面题目推导结果错误。所以在解题过程中,一定要认真仔细,掌握题目中给出公式、定义和提醒性信息。

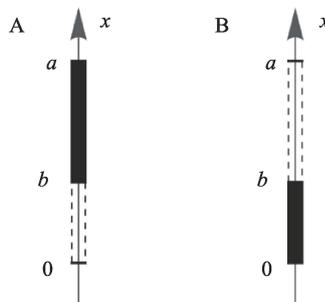


图1 一维晶体的晶胞,黑色区域为不透光的区域

## B部分: 二维晶体(5.0分)

### B.1(1.0分)

通过分析二维晶体结构(题目中提供图2)可以得到  $\vec{q}_1$  和  $\vec{q}_2$  的长度为:

$$|q_1| = \frac{2\pi}{a_2 \sin \alpha}, |q_2| = \frac{2\pi}{a_1 \sin \alpha} \text{ 或 } |q_1| = \frac{2\pi}{a_1 \sin \alpha}, |q_2| = \frac{2\pi}{a_2 \sin \alpha} \quad (\text{B1})$$

$q_1$  和  $q_2$  的夹角为  $\beta = \alpha$

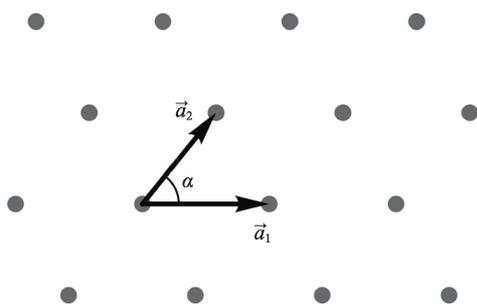


图2 以  $\vec{a}_1$  和  $\vec{a}_2$  作为格矢的二维晶体, 这些点表示晶体中原子的位置

### B.2(0.5分)

根据公式 A14 和 A16 可知, 如果透光区和非透光区互换, 除中心衍射斑点 ( $h=0, k=0$ ) 外的衍射结构因子的模相等, 所以可以推出二维晶体 A 结构因子为:

$$F(h, k) = \int_0^b \int_0^a e^{iq_x x} e^{iq_y y} dx dy = \frac{a^2}{\pi^2} \left| \frac{\sin(\pi hb/a)}{h} \cdot \frac{\sin(\pi kb/a)}{k} \right| e^{inb(h+k)/a} \quad (\text{B2})$$

$$|F(h, k)| = \frac{a^2}{\pi^2} \left| \frac{\sin(\frac{\pi hb}{a})}{h} \cdot \frac{\sin(\frac{\pi kb}{a})}{k} \right|, h \neq 0, k \neq 0 \quad (\text{B3})$$

晶体 D 的结构因子可以通过晶体 A 变换得来, 将晶体 A 的结构因子表达式乘以  $[1 + e^{in(h+k)}]$  就可得到。

### B.3(0.6分)

题目要求分析样品衍射图, 通过实验确定样品的晶格周期, 这需要利用与 A.4 相同实验光路, 观察样品衍射图, 可以观察到类似图 4 的衍射图样, 通过

测量衍射图中斑点距离可以求出衍射矢量和晶体周期, 求得样品的晶体周期为:

$$\begin{aligned} a_{UC1} &= 30\mu\text{m} \\ a_{UC2} &= 20\mu\text{m} \\ a_{UC3} &= 20\mu\text{m} \\ a_{UC4} &= 30\mu\text{m} \end{aligned}$$

### B.4(0.4分)

通过观察样品的衍射图样, 通过观察衍射斑点的缺失、斑点强度及 B.3 中求得的晶体周期, 可以判断出 UC1-UC4 对应的晶体结构为:

- UC1-B
- UC2-A
- UC3-D
- UC4-C

### B.5(0.8分)

要想确定不透光区域的边长  $b$ , 可以采用 A.5 类似的方法, 利用样品 UC1 的实验结果, 可以得到:  $b = 10\mu\text{m}$ 。

### B.6(1.2分)

题目要求通过实验确定每个样品的参数  $a_1, a_2$  和角  $\alpha$  (图 2), 首先搭建实验装置, 观察样品 UC5、UC6、UC7 的衍射图样。可以看到 UC5 衍射图样是矩形排布, UC6 和 UC7 为平行四边形排布, 如图 3 所示。测量并计算可以得到每个样品的参数  $a_1, a_2$  和角  $\alpha$  为:

$$\begin{aligned} \text{UC5: } & a_1 = 20\mu\text{m}, a_2 = 40\mu\text{m}, \alpha = 90^\circ \\ \text{UC6: } & a_1 = 36.1\mu\text{m}, a_2 = 22.4\mu\text{m}, \alpha = 63^\circ \end{aligned}$$

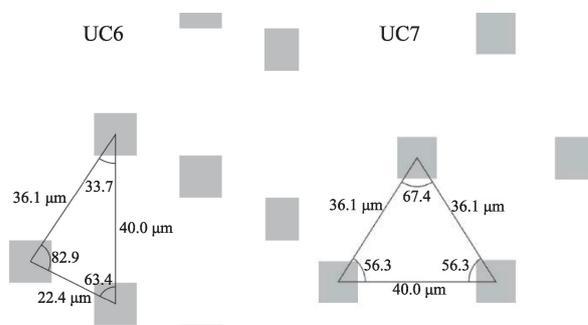


图3 样品 UC6、UC7 衍射图样

UC7:  $a_1=40\mu\text{m}$ ,  $a_2=36\mu\text{m}$ ,  $\alpha=56^\circ$

### B 部分评述

B 部分主要研究的是二维晶体的相关参数。实验采用与 A.4 相同的实验方案, 观察不同样品的衍射图样。通过分析衍射图样, 测量二维衍射斑点的距离等参数, 可以确定多种未知样品的晶体参数, 以及与题目给出的晶胞的对应关系。

## C 部分: 晶体的对称性(5.0 分)

### C.1(0.3 分)

根据题目中给出的旋转对称性的定义和二维晶体衍射图样(题目已给出, 图 4), 可以较容易地判断出旋转中心:  $h=0, k=0$ 。旋转对称阶  $m=1, 2, 4$ 。所有对称轴在图 4 中都已经标注出。

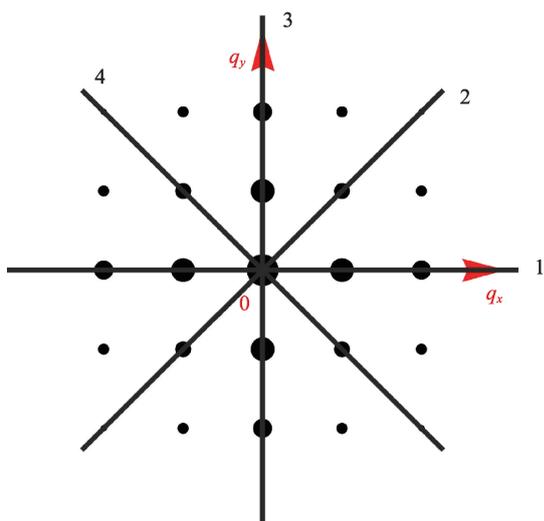


图 4 对称轴标注图

### C.2(0.2 分)

题目要求写出图 4 中绘制的每个镜像对称轴的直线方程, 对称轴是一条直线, 它可以表示为直线方程:  $c_1 \cdot q_x + c_2 \cdot q_y = d$ , 图 4 中镜像对称轴的方程为:

$$1: q_y = 0 \quad (C1)$$

$$2: q_y = q_x \quad (C2)$$

$$3: q_x = 0 \quad (C3)$$

$$4: q_y = -q_x \quad (C4)$$

### C.3(0.4 分)

通过分析衍射图样(图 4)可得, 每个旋转对称强度  $I(q_x, q_y)$  满足的方程:

$$C_1: I(q_x, q_y) = I(q_x, q_y) \quad (C5)$$

$$C_2: I(q_x, q_y) = I(-q_x, -q_y) \quad (C6)$$

$$C_4: I(q_x, q_y) = I(-q_y, q_x) \quad (C7)$$

每个镜像对称强度  $I(q_x, q_y)$  满足的方程:

$$q_y = 0: I(q_x, q_y) = I(q_x, -q_y) \quad (C8)$$

$$q_x = 0: I(q_x, q_y) = I(-q_x, q_y) \quad (C9)$$

$$q_y = q_x: I(q_x, q_y) = I(q_x, q_y) \quad (C10)$$

$$q_x = -q_y: I(q_x, q_y) = I(-q_y, -q_x) \quad (C11)$$

### C.4(0.2 分)

因为  $\rho(x) \in R$  (题目中给出), 结构因子有如下关系:

$$\begin{aligned} F(-h, -k) &= \int \rho(x, y) e^{-i(q_1 h_x + q_2 k_y)} dx dy \\ &= \left( \int \rho(x, y) e^{-i(q_1 h_x + q_2 k_y)} dx dy \right)^* \\ &= F^*(h, k) \end{aligned} \quad (C12)$$

这里的  $F^*$  是  $F$  的复共轭, 由 C12 可以推出:

$$\begin{aligned} I(-h, -k) &= F(-h, -k) F^*(-h, -k) \\ &= F(h, k) F^*(h, k) = I(h, k) \end{aligned} \quad (C13)$$

对应的对称性为  $C_2$ 。

### C.5(0.4 分)

为了用晶体 1 的结构因子表示其他晶体的结构因子, 可以先假设晶体 1 的结构因子为:

$$F(q_x, q_y) = \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(x, y) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \quad (C14)$$

根据对称性, 晶体 2 通过晶体 1 对  $x=0$  轴做变换可以得到,  $\rho_2(x, y) = \rho(-x, y)$ , 晶体 2 的结构因子为:

$$\begin{aligned} f_2(q_x, q_y) &= \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho_2(x, y) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \\ &= \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(-x, y) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \\ &= \int_{x_0}^{-x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(x, y) e^{i(-q_x x + q_y y)} d(-x) dy \\ &= F(-q_x, q_y) \end{aligned} \quad (C15)$$

晶体3通过晶体1对 $x=y$ 轴做变换可以得到, $\rho_3(x, y)=\rho(y, x)$ ,晶体3的结构因子为:

$$\begin{aligned} f_3(q_x, q_y) &= \iint \rho_3(x, y) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \\ &= \iint \rho(y, x) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \quad (C16) \\ &= \iint \rho(x, y) e^{i(q_y x + q_x y)} dx dy = F(q_y, q_x) \end{aligned}$$

晶体4通过晶体1平移可以得到,假设平移矢量为 $(x_1, y_1)$ , $\rho_4(x', y')=\rho(x+x_1, y+y_1)$ ,晶体4的结构因子为:

$$\begin{aligned} f_4(q_x, q_y) &= \iint \rho_4(x', y') e^{i(q_x x' + q_y y')} dx' dy' \\ &= \left( \iint \rho(x, y) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy \right) e^{i(q_x x_1 + q_y y_1)} \quad (C17) \\ &= F(q_x, q_y) e^{i(q_x x_1 + q_y y_1)} \end{aligned}$$

### C.6(0.5分)

要分析任意二维晶体的旋转对称性,可以假设图5中A和B是最近的两个点, $|\overline{AB}|=a$ 。如果该晶体是 $m$ 阶旋转对称,如果绕A旋转 $\theta=\frac{2\pi}{m}$ ,B点旋转到C点,同样的方法可以从A点旋转到D点。因为所有点是等价的,所以 $\overline{CD}=n \cdot \overline{AB}$ , $n \in Z$ 。因此:

$$\cos \theta = \frac{1-n}{2} \quad (C18)$$

表1  $n, \cos \theta, \theta, m$  的取值

$n$	$\cos \theta$	$\theta$	$m$
-1	1	$0^\circ$	1
0	1/2	$60^\circ$	6
1	0	$90^\circ$	4
2	-1/2	$120^\circ$	3
3	-1	$180^\circ$	2

$n, \cos \theta, \theta, m$  可能的值如表1所示:

所以所有可能的旋转对称有: $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ 。

### C.7(0.9分)

具有晶胞 $K, L, M, N, P, Q, R, S, T$ 的晶体的对称性示意图如图6所示,旋转对称性在图中已经标注。

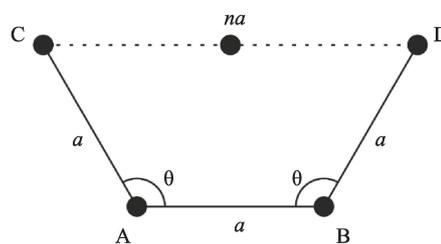


图5 对称旋转示意图

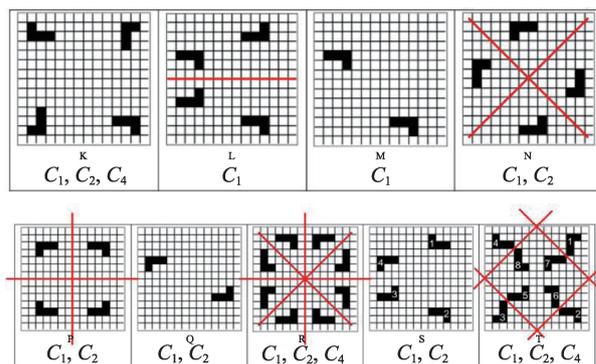


图6 晶胞的对称性示意图

### C.8(0.8分)

样品PG1、2、5、8对应于图6晶胞 $K, L, M, N$ ,要想确定对应关系,需要通过实验分析其衍射图样。表2为观察到的样品PG1、2、5、8的衍射图样对称性,表中“+”表示样品具有相应的对称性。对于样品PG1,理论上存在对称轴 $q_x=0$ ,但实际的衍射图样可能观察不到。

表2 样品PG1、2、5、8的衍射图样对称性

PG	$q_x=0$	$q_y=0$	$q_x=q_y$	$q_x=-q_y$	$C_4$
1	+/-*	+			
2					
5			+	+	
8					+

PG1因为具有 $q_y=0$ 轴对称性,根据图6判断其对应L,PG2不具有上述对称性,所以对应于M,PG5具有两条对称轴,所以其对应于N,所有样品与晶胞的对应关系为:

PG1-L

PG2-M

PG5-N

PG8-K

### C.9(1.0分)

样品 PG3、4、6、7、9 对应于图 6 晶胞 P、Q、R、S、T。要想确定对应关系,需要通过实验分析其衍射图样。表 3 为观察到的样品 PG3、4、6、7、9 的衍射图样对称性,表中“+”表示样品具有相应的对称性。

表 3 样品 PG3、4、6、7、9 的衍射图样对称性

PG	$q_x = 0$	$q_y = 0$	$q_x = q_y$	$q_x = -q_y$	$C_4$
3	+	+			
4	+	+	+	+	+
6	+	+	+	+	+
7					
9	+	+			

PG4 和 PG6 的衍射图样具有  $C_4$  对称性(如晶胞 R、T),而其他的都不具有。在这组样品中,对称性不足以匹配晶胞和衍射图样。我们需要使用加法定则,并理解晶胞 S 和 T 的缺失。

对于 S 晶胞,将不透光元素进行标记,如图 6 所示。元素 1 的结构因子用  $F(h, k)$  表示,利用 C.5 的解题方法可以得到其他元素结构因子的表达式为:

$$f_1(h, k) = F(h, k) \quad (C19)$$

$$f_2(h, k) = F(-h, -k)e^{i5\pi h/7} \quad (C20)$$

$$f_3(h, k) = F(-h, k)e^{-i\pi(\frac{2h}{7} + h)} \quad (C21)$$

$$f_4(h, k) = F(h, -k)e^{-i\pi(h+k)} \quad (C22)$$

S 晶胞的结构因子为上面之和,对于  $h=0$  的衍射斑点有:

$$f_s(0, k) = (1 + \cos(\pi k))(F(0, k) + F(0, -k)) \quad (C23)$$

对于  $h=0$  时,衍射斑点会在  $k$  为奇数时缺失,同样可以推出  $k=0$  时,衍射斑点会在  $h$  为奇数时缺失。衍射图样具有这种特性的只有 PG6 和 PG9,因为 PG6 对应晶胞 R 或 T,所以 PG9 对应 S。

对晶胞 T 采用同样的方法,可以得到元素结构因子的表达式为:

$$f_1 + f_5 = F(h, k) + F(k, h)e^{-i\pi(h+k)} \quad (C24)$$

$$f_2 + f_6 = F(k, -h) + F(h, -k)e^{-i\pi(h-k)} \quad (C25)$$

$$f_3 + f_7 = F(-h, -k) + F(-k, -h)e^{-i\pi(-h-k)} \quad (C26)$$

$$f_4 + f_8 = F(-k, h) + F(-h, k)e^{-i\pi(-h+k)} \quad (C27)$$

对于  $h=0$  的衍射斑点有:

$$f_7(0, k) = (1 + \cos(\pi k))(F(0, k) + F(k, 0) + F(0, -k) + F(-k, 0)) \quad (C28)$$

对于  $h=0$  时,衍射斑点会在  $k$  为奇数时缺失,同样可以推出  $k=0$  时,衍射斑点会在  $h$  为奇数时缺失。PG6 衍射图样具有这样的特性,所以 PG6 对应 T,所以 PG4 对应 R。PG3 衍射图样具有对称轴,其对应于 P, PG7 对应 Q。

### C.10(0.3分)

要想判断样品 UC8 是不是晶体,需要通过实验观察 UC8 的衍射图样,判断其衍射图样具有的对称性。通过实验发现 UC8 具有  $C_3$  对称,而根据 C.6 的结果,晶体所有可能的旋转对称有:  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ , 所以 UC8 不可能是晶体。

### C 部分评述

C 部分主要研究的是晶体中的晶胞对称性。本题主要研究镜像对称和旋转对称,其中 C.1~C.7 为衍射图样和晶体结构对称性分析和公式推导,并不涉及实验操作,解题过程中要利用题目中给出的对称性和结构因子的定义。C.8~C.10 是通过实验观察样品的衍射图样,通过分析衍射图样的对称性,确定样品对应的晶胞类型,解题过程中要利用晶胞的对称性导致的相互对称和系统性缺失以及加法定则。

### D 部分: 相位问题(5.0分)

#### D.1(1.0分)

题目要求用强度  $I_0$  的入射光照射晶体 MR0 或 MR2, 求出 0 级衍射斑点的强度, 因为 0 级衍射斑点的强度  $E$  与透光面积成正比, 而光强  $I$  为场强的平方, 可以得到下面两个公式:

$$E = \frac{N_{transparent}}{N_{all}} E_0 \quad (D1)$$

$$I = \left( \frac{N_{transparent}}{N_{all}} \right)^2 I_0 \quad (D2)$$

其中  $N_{transparent}$  和  $N_{all}$  分别为透光方块数和总的方块数。MR0和MR2透光方块数分别为5和7,利用公式D2可以求出0级衍射斑点的强度分别为:

$$I_{MR0} = \left( \frac{5}{16} \right)^2 I_0 \quad (D3)$$

$$I_{MR2} = \left( \frac{7}{16} \right)^2 I_0 \quad (D4)$$

### D.2(2.0分)

为了确定MR1的晶胞结构,需要通过实验测量MR1衍射斑点强度  $I(h,k), |h| \leq 2, |k| \leq 2$ , 测量结果如图7所示,

MR1					
k	2	1	0	-1	-2
	5.7	19.1	1.6	24.6	15.8
	36.5	49.2	40.2	3	20.8
	2.3	20	336	33.5	0.9
	22	3.1	23.2	46.5	25.5
	2.9	23.9	2	38.5	7.3
	-2	-1	0	1	2
	h				

图7 MR1衍射斑点强度

通过逆傅里叶变换可以得到:

$$\rho(\chi, \gamma) = \sum_{h=-2}^2 \sum_{k=-2}^2 \sqrt{I(h,k)} \cdot e^{i\varphi(h,k)} \cdot \exp\left(-2\pi i \left(\frac{\chi}{4}h + \frac{\gamma}{4}k\right)\right), \quad (D5)$$

$\chi \in 0, 1, 2, 3, \gamma \in 0, 1, 2, 3$

因为  $\rho(\chi, \gamma)$  是实数,所以只计算实部就足够了。

$$\rho(\chi, \gamma) = \sum_{h=-2}^2 \sum_{k=-2}^2 \sqrt{I(h,k)} \cdot \cos\left(\varphi(h,k) - \frac{\pi}{2}(\chi h + \gamma k)\right) \quad (D6)$$

通过D6计算可以得到晶胞的振幅透射率如图8所示,透射率较小的地方为不透光区域,透射率较大的地方为透光区域,根据图8可以判断MR1的晶胞应为X。

MR1				
γ	3	2	1	0
	5.4	4.4	22.6	-9.7
	-1.7	58.	-13.5	61.1
	6.	49.1	61.9	-14.4
	53.8	12.7	-7.5	5.1
	0	1	2	3
	χ			

图8 MR1透射率

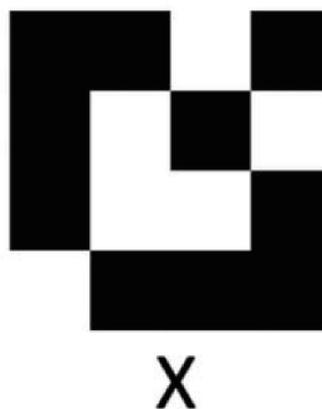


图9 X晶胞

### D.3(2.0分)

题目要求确定MR2的晶胞结构,解题时可以利用D.2同样的方法,可以得到MR2的衍射斑点强度和透射率,如图10和图11所示。

题目中提示MR2相比于MR0,只是两个不透明的方格变成透明的方格,通过与MRO对比,可以发现MR2在(0,2)和(3,0)两个位置变成透光,所以

MR2					
k	2	1	0	-1	-2
	2	43.3	45.2	39.7	8.9
	7.2	8.5	69.8	47.9	3.2
	8.8	11.7	508	4.7	1.7
	1.3	40.4	69.7	10	9.3
	1.7	56.9	25.8	54.8	1.3
	-2	-1	0	1	2
	h				

图10 MR2衍射斑点强度

		MR2			
y	3	-10.5	5.8	7.3	-19.4
	2	41.5	65.3	2.6	57.9
	1	-12.6	46.6	69.1	-0.4
	0	54.7	11.9	-5.9	46.7
		0	1	2	3
		x			

图 11 MR2透射率

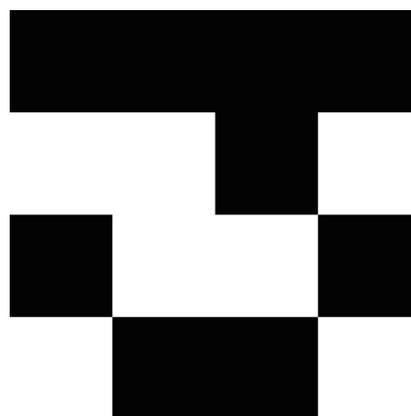


图 12 MR2 晶胞结构

MR2 的结构如图 12 所示。

### D 部分评述

D 部分主要研究的是相位问题。本题主要是利用已知的结构的 MR0 晶胞, 确定未知晶胞的结构。解题过程中, 需要通过实验测量衍射斑点的强度分布, 然后将其转化为透射率分布, 并通过与已知晶胞结构对比就可以确定 MR1 和 MR2 的结构。

本次试题利用晶体的周期性, 通过衍射的方法研究晶体结构。试题通过研究晶胞的参数、晶胞的对称性和相位, 从而确定晶体的结构。试题有很多的理论分析和公式推导, 试题题量大, 考察的内容和知识点很全面, 具有一定难度。



## 科苑快讯

### 将信息用 3D 打印机美味安全地嵌入食品中

保质期、产地、过敏原等信息都写在包装上, 可是如果失去包装, 又怎么了解这些信息呢? 大阪大学的一个研究组成功地以肉眼察觉不到的方式在饼干等食品中植入信息, 按照设计用“食物 3D 打印机”加入图案制作之后, 从背后打光读取信息。既不破坏食品外观, 又能保证食品安全。

从烤好的曲奇饼干背面打光, 内部的二维码就浮现出来, 拍摄后就可以读取。在制作二维码的实验中, 如果把编码的黑色部分单纯作为空隙, 烤饼干时表面会出现明显的凹凸, 导致无法读取。为了防止面团在烤时膨胀, 底部开了小洞后, 表面就多少出现了明显凹凸。如果加上支撑空间的细支撑结构, 虽然抑制了凹凸, 但却读取不出来。支撑结构如果只安装在大空间, 凹凸不明显, 读取效果也最好。

代码包含了 56 位, 相当于 32 个英文字母的信息。除了曲奇饼, 用猪肉末做成的肉饼状食品也能读取编码。和果子(日本传统糕点)中的年糕、巧克力等不能顺利读取, 而美味饼干中的芝麻, 则会堵住打印机喷嘴。

如果在食品中嵌入编码, 将有助于加强生产流通的可追溯性。还可以加入制作者推荐的食物搭配信息, 通过与网络连接的咖啡机, 以最适合品尝的温度和浓度自动加入咖啡——这些独特功能也是值得期待的。另外, 加入 AR 标记、投影图形等, 还可以增加食用的娱乐性。研究组认为, 对数据植入的食用体验, 大家可以尽情发挥想象。

(高凌云编译自 2022 年 10 月 25 日 Science Portal 网站)