

文章编号:1005-4642(2021)04-0022-10



2020 年国际物理奥林匹克竞赛 实验试题介绍及解答

荀 坤, 李 智, 穆良柱, 陈志坚, 陈晓林
(北京大学 物理学院, 北京 100871)

摘 要:2020 年国际物理奥林匹克竞赛实验试题为“晶体学”。试题从一维光栅出发, 引导选手寻找衍射花样和晶体结构间的对应关系, 最后测定出未知晶体的结构。本文介绍了试题内容和组委会提供的标准答案, 并且在个别处提供了其他解法。

关键词:国际物理奥林匹克竞赛; 晶体学; 晶胞; 结构因子; 对称性; 衍射

中图分类号:O7

文献标识码:B

DOI:10.19655/j.cnki.1005-4642.2021.04.004

因新冠肺炎疫情全球爆发, 原计划于 2020 年 7 月在立陶宛共和国举行的第 51 届国际物理奥林匹克竞赛 (IPhO) 被顺延至次年。就在各队为本年度选手失去参赛机会而惋惜时, 俄罗斯在国际物理奥林匹克竞赛委员会的授权下主办了此次特别的国际物理奥林匹克竞赛 (International Distributed Physics Olympiad, IdPhO2020), 各参赛方在主办方代表监督下在本国参加比赛。经主办方艰苦努力和各参赛方密切配合, 竞赛得以于 2020 年 12 月 8—15 日在跨越 14 个时区的全球多地成功举行。2020 年初选拔产生, 9 月已经进入北京大学学习的 5 名代表中国参赛的选手以较大优势包揽了本次竞赛的前 5 名。其中, 来自长沙市第一中学的张意飞同学更是赢得了理论、实验和总成绩 3 项第一。

竞赛实验器材由主办方代表在考试前 2 h 带到考场。实验试题名为“晶体学”, 时长为 5 h, 不要求分析误差^[1]。试题内容几乎涵盖了通过衍射确定晶体结构的所有方面, 篇幅长, 内容多, 故介绍试题时会在图文上做一定压缩。试题解答的重点也放在方法和最后结果上, 中间过程能省则省略。本文结构参考了文献[2]。

1 试题介绍

晶体是指由 1 个基本单元(晶胞)在空间周期

性排列形成的结构。如 $\rho(r)$ 为描述晶体结构的实函数, a_1, a_2 和 a_3 为 3 个线性无关的矢量, 则对整个晶体有:

$$\rho(r + e \cdot a_1 + f \cdot a_2 + g \cdot a_3) = \rho(r), \quad e, f, g \in Z, \quad (1)$$

其中, a_1, a_2 和 a_3 被称为晶格矢量, 简称格矢。晶体也可以只是一维或二维的。本题的任务是确定晶体结构, 也即晶胞结构 $\rho(r)$ 和格矢 a_1, a_2 和 a_3 。

由于晶体具有周期性, 可以用衍射的方法来确定其结构。如图 1 所示, 强度为 I_0 , 波矢为 k_i ($|k_i| = \frac{2\pi}{\lambda}$) 的光垂直入射, 透过样品后的散射波可用散射波矢 k_s 或散射矢量 $q = k_s - k_i$ 表示。对于弹性散射, 散射和入射波矢的模相等, 故有 $q = 2k_i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$, 其中 θ 为散射角。本题中可以认为 $\theta \ll 1$ 。

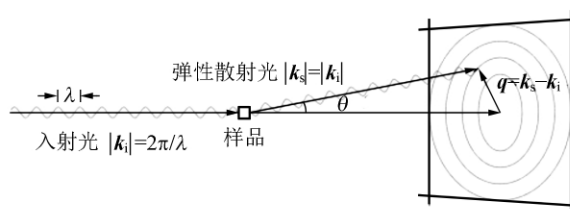


图 1 散射矢量示意图

收稿日期:2021-03-11

作者简介:荀 坤(1961—), 男, 贵州兴义人, 北京大学物理学院副教授, 博士, 研究方向为磁性薄膜。
E-mail: kunxu@pku.edu.cn



要求:在 A 部分以衍射光栅(一维晶体)为例研究晶体衍射的最基本规律;在 B,C 和 D 部分要分别确定未知晶体的晶格参量、晶胞的对称性和结构细节.

1.1 从狭缝到晶体

如图 2 所示,衍射光栅是最简单的一维晶体,狭缝和两狭缝间的区域构成晶胞,格矢 a_1 等于光栅常量 a .

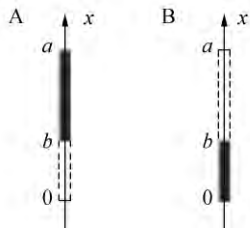


图 2 一维晶体的晶胞(不透光区域用粗黑线表示)

当观察光栅的夫琅禾费衍射时,光强与衍射角 θ 的关系为

$$I(\theta) = \frac{I_0}{N^2} \left[\frac{\sin\left(\frac{N\pi a \sin\theta}{\lambda}\right)}{\sin\left(\frac{\pi a \sin\theta}{\lambda}\right)} \right]^2 \cdot \left[\frac{\sin\left(\frac{\pi b \sin\theta}{\lambda}\right)}{\frac{\pi b \sin\theta}{\lambda}} \right]^2, \quad (2)$$

其中, I_0 为 $\theta=0$ 时的光强, N 为被照明的光栅狭缝数.

A. 1 利用散射矢量 $q (q \ll k_i)$ 重新写式(2). (0.3 分)

A. 2 写出光栅常量为 a 的光栅的第 h 个衍射极大的散射矢量 q . (0.2 分)

A. 3 设 q_1 为 1 级衍射极大对应的散射矢量. 用 q_1 表示各级衍射极大的散射矢量 q . q_1 和 a 间有何关系? (0.2 分)

A. 4 观察样品 DG1~DG5 的衍射. 用实验方法确定每一样品的 q_1 和 a . 画出装置示意图, 写出所测得的量及用于计算的公式. (1.0 分)

A. 5 由实验得到样品 DG3~DG5 的 a 与 b 之比 a/b . 用公式和示意图来解释求解方法. 已知 $b \leq a/2$. (1.5 分)

衍射极大的位置和强度分别由晶体的周期 ($a_1=a$) 和晶胞参量(狭缝宽度 b) 决定. 为简化强度计算, 可以引入被称为结构因子的复函数:

$$F(q) \sim \int \rho(x) \exp(iqx) dx, \quad (3)$$

其中, $\rho(x)$ 是振幅透射率(本题中可视为实数), q

是散射矢量, 积分区域为整个晶胞(本文所有结构因子表达式的积分区域也都是整个晶胞, 一般不再标出). 将所对应的 q 代入, 得到各衍射极大的相对强度: $I = |F|^2$.

衍射强度极大位置(衍射斑点)总可以表示成矢量(倒格矢)之和:

$$1D: q = h \cdot q_1, \quad (4)$$

$$2D: q = h \cdot q_1 + k \cdot q_2, \quad (5)$$

$$3D: q = h \cdot q_1 + k \cdot q_2 + l \cdot q_3, \quad (6)$$

其中 $h, k, l \in Z$.

每个衍射斑点, 以 3D 的为例, 可以用 1 组数 (h, k, l) 标记, 对应的复振幅和强度分别记为 $F(h, k, l)$ 和 $I(h, k, l)$.

A. 6 按图 2 坐标系写出图 2 中 A 所示衍射光栅晶胞的 $\rho(x)$. 设光栅常量 $a = pb, p \in N$, 计算此晶胞由 h 标记的衍射斑点的结构因子 $F_A(h)$, 用 h 和 q_1 表示. 哪些极大的强度为 0? 写出这类极大的 h 满足的方程. (0.7 分)

A. 7 对另一个晶胞(图 2 中 B)重复 A. 6. (0.7 分)

A. 8 如用同样强度的光照射上述两光栅, 请给出光强比: $\frac{I_{A,h=0}}{I_{B,h=0}}$ 和 $\frac{I_{A,h=1}}{I_{B,h=1}}$. (0.4 分)

1.2 2D 晶体

图 3 为以 a_1 和 a_2 为格矢的 2D 晶体, 习惯上取格矢间夹角 $\alpha \leq 90^\circ$, 图中圆点表示晶体中的等价位置. 如果平行单色光垂直照射到如图 3 所示的 2D 晶体面上, 会在其后的屏上出现周期性的衍射花样, 各极大位置可以用式(5)描述.

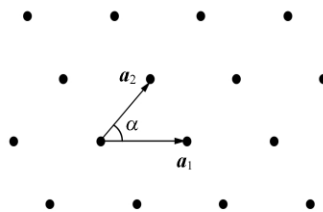


图 3 2D 晶体

B. 1 用晶体参量 a_1, a_2 和 α (图 3) 表示矢量 q_1 和 q_2 的长度及其夹角 β . (1.0 分)

图 4 给出了 4 种晶胞都为正方形的晶体, 2 个格矢长度相等且相互垂直. 晶胞内黑色正方形完全不透光, 其他部分则完全透光. 对晶胞 C 有 $b' > b$. 晶胞 D 中 2 个黑方块完全相同, 一个相对于另一个向右和向上分别移动了半个格矢.

B.2 对晶体 A 和 D 给出衍射斑点 (h, k) 对应的结构因子的模 $|F(h, k)|$, 用 a 和 b 表示. 只需给出 1 个除中心斑点 $(h=0, k=0)$ 外都成立的表达式. (1.0 分)

B.3 观察样品 UC1~UC4 的衍射花样, 用实验方法确定它们的晶体周期 $a_{UC1}, a_{UC2}, a_{UC3}$ 和 a_{UC4} . (0.6 分)

B.4 给出 UC1~UC4 与图 4 中各晶胞的对应关系, 并做解释. (0.4 分)

B.5 确定尺寸 b . (0.8 分)

B.6 样品 UC5~UC7 是简单的 2D 晶体. 观察它们的衍射花样, 用实验方法确定每一样品的参量 a_1, a_2 及其夹角 α , 并解释用到了衍射花样的哪些参量. (1.2 分)

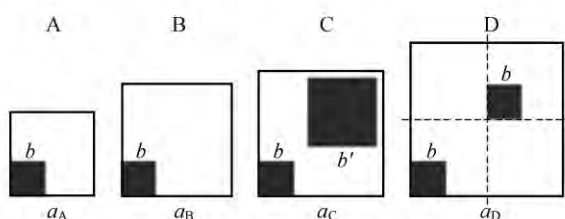


图 4 A~D 的晶胞是正方形(除 $a_B > a_A$ 外, 其他尺寸比都未知)

1.3 晶体的对称性

如图 5 所示, 实际晶体的晶胞中常常会含有存在对称性的几个分子. 知道这些对称性有助于确定晶胞结构. 晶胞的对称性会使得 h 和 k 满足某些条件的衍射斑点系统性缺失(消光).

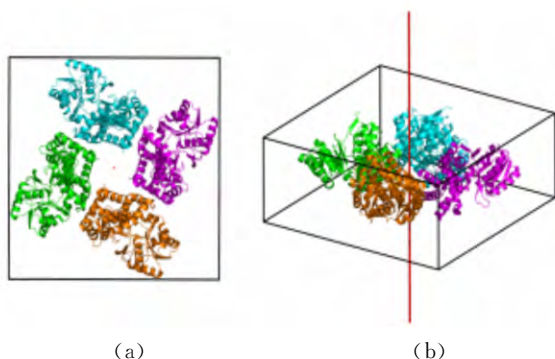


图 5 晶胞具有 C_4 对称的示例[绕图(b)中竖直线转 90° 的整数倍后晶胞会复原]

衍射斑点强度分布的典型对称性有: 以某直线为对称轴的镜像对称, 用该直线的方程来标记; 绕对称轴转过 $360^\circ \frac{n}{m}$ 时, 能使衍射花样复原的 m

阶旋转对称, 用 C_m 标记, $n \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{N}$.

图 6 是格矢大小相等($a_1 = a_2$)且相互垂直的 2D 晶体的衍射图(仅画了 $|h|, |k| \leq 2$ 的部分).

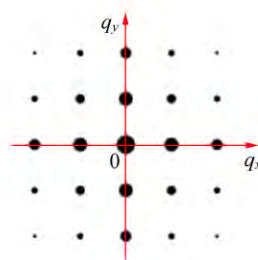


图 6 2D 晶体的衍射图

C.1 给出其旋转对称中心的 h 和 k . 该图的旋转对称阶 m 可能取哪些值? 画出所有可能的镜像对称轴, 并给它们命名. (0.3 分)

C.2 写出上一任务中所画出并命名的每一镜像对称轴的直线方程. (0.2 分)

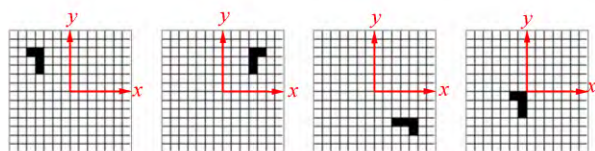
C.3 对每一旋转对称和镜像对称, 写下它们的记号(旋转对称用 C_m , 镜像对称用直线方程), 以及存在该对称元素时强度 $I(q_x, q_y)$ 满足的方程. (0.4 分)

C.4 写出衍射斑点 (h, k) 和 $(-h, -k)$ 的强度满足的方程. 指出任务 C.1 中与此方程相对应的对称性并做解释. (0.2 分)

图 7 各晶胞中的白、黑格子分别代表透光和不透光. 晶胞 2 和 3 分别由晶胞 1 对 $x=0$ 轴和 $x=y$ 做镜像变换得到. 晶体 4 由晶体 1 平移 (x_1, y_1) 得到.

C.5 利用结构因子的定义和对称性, 分别将晶体 2~4 的结构因子用晶体 1 的结构因子表示. (0.4 分)

C.6 2D 晶体中旋转对称阶 m 只能取哪些值? 说明原因. (0.5 分)



(a)1:原初 (b)2: $x=0$ (c)3: $y=x$ (d)4:平移

图 7 通过不同对称操作可由晶体 1 得到晶体 2~4

参照答题纸上所给晶胞示意图 18:

C.7 确定晶胞 K, L, M, N, P, Q, R, S 和 T 具有的对称性, 镜像对称轴直接画在图中, 旋转对

称符号标在图下方。(0.9 分)

C.8 观察样品 PG1,2,5 和 8 的衍射花样,确定这些衍射花样有何对称性,并给出它们与晶胞 K,L,M 和 N 间的对应关系。(0.8 分)

C.9 观察样品 PG3,4,6,7 和 9 的衍射花样,给出它们和晶胞 P,Q,R,S 和 T 间的对应关系,并说明理由。(1.0 分)

C.10 观察样品 UC8 的衍射花样.它可能是晶体吗?请解释原因。(0.3 分)

1.4 相位问题

入射光经晶体散射后的复振幅由下式(傅氏变换)给出:

$$F(\mathbf{q}) \sim \int \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (7)$$

由结构因子经逆傅氏变换亦可反推出:

$$\rho(\mathbf{r}) \sim \int F(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{q}, \quad (8)$$

对离散衍射斑点,积分可以变成求和:

$$\rho(\mathbf{r}) \sim \sum |F(\mathbf{q})| \exp(i\varphi) \cdot \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (9)$$

实际只需对式(9)中的强衍射斑点求和即可.衍射斑点强度能给出结构因子的模,但不能给出相位,由式(9)不能直接解出 $\rho(\mathbf{r})$. 为此,通常会取近似的初始相位,先用式(9)得到 $\rho(\mathbf{r})$,再将得到的 $\rho(\mathbf{r})$ 代入式(7)来更新相位,不断重复,直到收敛.如果已知某晶体结构与待测晶体的类似,即可用该晶体的相位作为待测晶体的初始相位.

MR0,MR1 和 MR2 的晶胞都由 4×4 阶的透光($\rho=1$)或不透光($\rho=0$)方块组成. MR0 的晶胞结构已知,如图 8 所示.

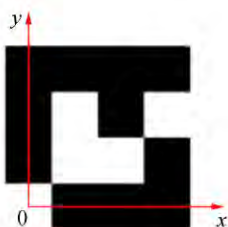


图 8 MR0 的晶胞结构(白方块透光,黑方块不透光)

晶体 MR1 结构未知,但应为图 9 中之一. 晶体 MR2 的结构和 MR0 的非常接近,但有 7 个透光方块. 图 10 给出了 MR0 晶体 $|h|, |k| \leq 2$ 衍射斑点的相位(单位为 rad).

D.1 如果入射光强为 I_0 ,请给出 MR0 或者

MR2 的 0 级衍射斑点的强度。(1.0 分)

D.2 确定晶体 MR1 的晶胞,并说明原因。(2.0 分)

D.3 若 MR2 的晶胞与 MR0 的差别仅为其中 2 个方格从不透光变成透光,请确定其结构。(2.0 分)



图 9 MR1 晶体可能的晶胞

2	3.142	0.463 6	0	-0.463 6	3.142
1	0	-0.463 6	2.034	-1.571 0	0
0	3.142	-1.571 0	0	1.571 0	3.142
-1	0	1.571 0	-2.034	0.463 6	0
-2	3.142	0.463 6	0	-0.463 6	3.142
	-2	-1	0	1	2
	h				
k					

图 10 MR0 晶体 $|h|, |k| \leq 2$ 衍射斑点的相位

1.5 实验器材

实验器材如图 11 所示. 1 为数字万用表,2 为带磁铁的光电二极管,3 为 9 V 电池,4 为 10 k Ω 和 200 k Ω 电阻,5 为连接器(4 个),6 为电池引线座,7 为 630 nm 波长激光器,8 为光具座,9 为针,10 为胶带,11 为螺丝刀,12 为直尺,13 为大铁夹(2 个),14 为卷尺,15 为样品(分别标有 Diffraction grating, Unit cell, Plane group 和 Molecular replacement),16 为衰减片,17 为小铁夹(4 个),18 为样品座(需自己组装),19 为绘图纸,20 为黑卡纸,21 为带磁性的平板.

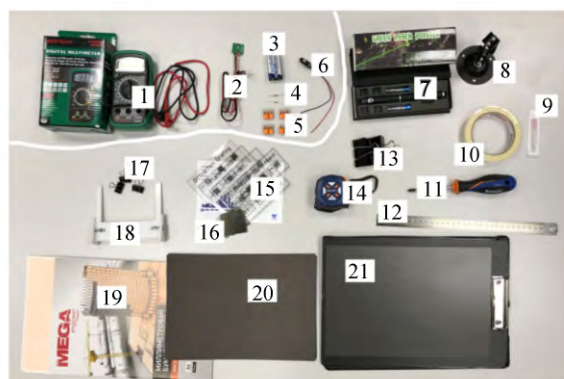


图 11 实验器材(白线画出的左上部用于光强测量)

图 12 示意了如何将激光器装在光具座上并且用大铁夹来控制其开关,如何用针和胶带纸减小激光光束的尺寸,以及如何用衰减片来减弱光强.图 13 示意了激光器、样品和观察屏应该如何放置.



图 12 激光器和衰减片的使用示意图

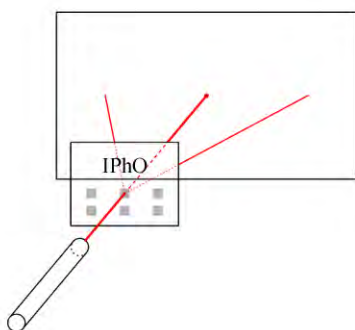


图 13 激光器、样品和观察屏的放置示意图

流过光电二极管的电流与照在其上的光强成正比.用电池引线座和连接器将万用表、光电二极管、电阻和电池按图 14 连接,就可得到光强探测器.电阻大小可视光强做选择.

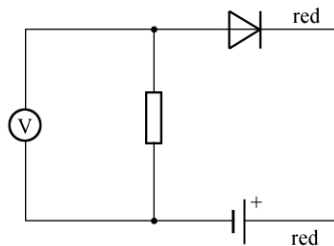


图 14 光强探测器线路

2 试题解答

A.1 将 $q = 2k_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ 代入式(2),并注意

到条件 $q \ll k_1$, 立即可得:

$$I = \frac{I_0}{N^2} \left[\frac{\sin(Nqa/2)}{\sin(qa/2)} \right]^2 \left[\frac{\sin(qb/2)}{qb/2} \right]^2. \quad (10)$$

A.2 可由光栅衍射方程直接推出:

$$q = \frac{2\pi}{a}h, h \in Z. \quad (11)$$

A.3 由式(11)立即可得:

$$q = q_1 h, h \in Z, \quad (12)$$

$$q_1 a = 2\pi. \quad (13)$$

A.4 图 15 为衍射光路示意图,其中, L 和 s_N 分别是样品到观察屏和 0 级到第 N 级衍射斑点的距离.

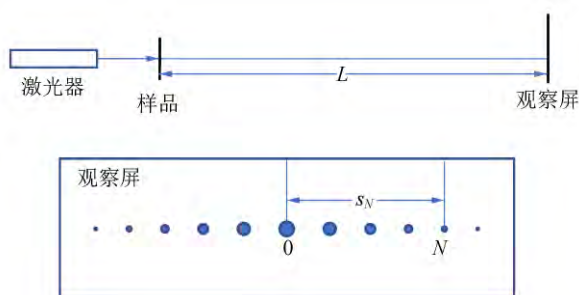


图 15 衍射光路及衍射光斑示意图

确定 q_1 的公式为

$$q_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \frac{s_N}{NL}, \quad (14)$$

q_1 与 a 满足:

$$q_1 a = 2\pi. \quad (15)$$

对每一样品,分别测量 L 和 s_N ,再利用式(14)和(15),求出对应的光栅常量.标准答案为
 DG1: $q_1 = (320 \pm 32) \text{ mm}^{-1}$, $a = (20 \pm 2) \mu\text{m}$;
 DG2: $q_1 = (130 \pm 13) \text{ mm}^{-1}$, $a = (50 \pm 5) \mu\text{m}$;
 DG3~DG5: $q_1 = (79 \pm 8) \text{ mm}^{-1}$, $a = (80 \pm 8) \mu\text{m}$.

A.5 由式(10)推出第 h 级衍射极大的强度为

$$I(h) = I_0 \left[\frac{\sin(\pi bh/a)}{\pi bh/a} \right]^2, \quad (16)$$

则第 1 和第 2 级衍射极大强度满足:

$$\frac{\pi b}{a} = \arcsin \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{I(1)}{I(2)}} \sin\left(\frac{2\pi b}{a}\right) \right]. \quad (17)$$

将测得的第 1 和第 2 级衍射极大强度值代入,可解出 a/b . 标准答案为

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

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

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

式(17)是超越方程,规则不允许使用可编程

计算器,很难求解.中国选手普遍采用某级衍射极大缺失来求 a/b ,被以方法没有普适性为由扣分.实际上也观察不到衍射斑点明显缺失.其实,利用 0 级衍射光强和透光面积平方成正比就可以快捷地求出 a/b .更简单地,将光电二极管紧贴光栅之后测量光栅平均的透光率也可以求出 a/b .用这 2 种方法得到的 DG3, DG4 和 DG5 的 a/b 分别为:7.9 和 7.3, 4 和 4.2, 1 和 2, 均落在标准答案区间内.

A.6 对照图 2 直接可以写出:

$$\rho(x) = \begin{cases} 1, x \in [0, b); \\ 0, x \in [b, a). \end{cases} \quad (18)$$

将式(18)代入式(3),经积分、化简后可得:

$$F_A(h) = 2 \frac{\sin(\pi h/p)}{q_1 h} \cdot \exp(i\pi h/p) = \begin{cases} \frac{2\pi}{q_1} \cdot \frac{1}{p}, h=0; \\ F_1(h), h \neq 0, \end{cases} \quad (19)$$

其中, $p = a/b$. 强度为 0 的极大点满足: $h = \pm pm, m \in \mathbb{N}$.

A.7 仿照 A.6, 不难得到:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, x \in [0, b); \\ 1, x \in [b, a). \end{cases} \quad (20)$$

$$F_B(h) = 2 \frac{\sin(\pi h)}{q_1 h} \exp(i\pi h) - 2 \frac{\sin(\pi h/p)}{q_1 h} \exp(i\pi h/p) = \begin{cases} \frac{2\pi}{q_1} \left(1 - \frac{1}{p}\right), h=0; \\ -F_1(h), h \neq 0. \end{cases} \quad (21)$$

强度为 0 的极大点满足: $h = \pm pm, m \in \mathbb{N}$.

可以看出图 2 中 A 和 B 的非 0 级衍射斑点强度完全相同.

A.8 对比式(19)和(21), 立即可得:

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

B.1 总可以在图 3 中画一系列过格点的平行线使所有格点落在这些平行线上. 这样, 在垂直于这些平行线的方向上, 1 个 2D 晶格的衍射可以看成光栅常量为平行线间距的光栅的衍射. q_1 和 q_2 标示的是距 0 级斑点最近的衍射斑点, 对应平行线间距最大时的衍射. 平行线间距最大意味着平行线上相邻 2 点的距离最短. 也就是说这样的平行线方向只能与 a_1 或 a_2 一致. 不难导出, 对

应的线间距分别为 $a_2 \sin \alpha$ 和 $a_1 \sin \alpha$.

从上面讨论可以看出, q_1 和 q_2 分别与 a_1 或 a_2 之一垂直, 不妨取 $q_1 \perp a_2$, 有:

$$|q_1| = \frac{2\pi}{a_1 \sin \alpha}, |q_2| = \frac{2\pi}{a_2 \sin \alpha}, \quad (22)$$

q_1 和 q_2 的夹角 $\beta = \alpha$.

B.2 标准答案只给了晶体 A 的结构因子. 由式(19)和式(21)可以看出, 如果透射率 0 与 1 互换, 非 0 级衍射斑点结构因子的模相同. 因此, 可以用透光与不透光区域正好相反的结构来代替晶体 A:

$$F(h, k) = \int_0^b \int_0^b \exp(iq_x x) \exp(iq_y y) dx dy = \frac{a^2}{\pi^2} \left| \frac{\sin\left(\pi \frac{hb}{a}\right)}{h} \cdot \frac{\sin\left(\pi \frac{kb}{a}\right)}{k} \right| \exp\left[i\pi \frac{b(h+k)}{a}\right], \quad (23)$$

或

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

容易推出, 晶体 D 的结构因子为晶体 A 的结构因子乘以因子 $[1 + e^{i\pi(h+k)}]$.

B.3 采用和 A.4 相同的光路, 在衍射屏上会看到类似图 6 的衍射图. 测量斑点间距即求出衍射矢量, 再由衍射矢量求出晶体周期. 标准答案为: $a_{UC1} = (29.5 \pm 2.0) \mu\text{m}$, $a_{UC2} = (19.7 \pm 1.3) \mu\text{m}$, $a_{UC3} = (19.7 \pm 1.3) \mu\text{m}$ 或者 $a_{UC3} = (13.9 \pm 1.0) \mu\text{m}$, $a_{UC4} = (29.5 \pm 2.0) \mu\text{m}$, 其中 UC3 有 2 种答案: 一种对应晶胞 D, 另一种改变晶胞取法使其内只包括 1 个黑方块.

B.4 观察各样品的衍射花样:

1) 由 $h+k$ 为奇数的斑点缺失, 可以断定 UC3 对应晶体 D.

2) 由 $a_B > a_A$, 结合 B.3 的结果知 UC2 对应晶体 A.

3) 由 UC1 的 0 级斑点强度明显比 UC4 的强, 知 UC1 对应晶体 B, UC4 对应晶体 C.

B.5 标准答案说, 比照 A.5 中的方法, 用 UC1 的实验结果可以得到 $b = (10 \pm 2) \mu\text{m}$. 其实也可以通过比较 A 和 B 2 种晶体的 0 级斑点强度来测量, 这样测得的结果为 $b = 9.6 \mu\text{m}$.

B.6 观察各样品的衍射花样:

1) UC5 的衍射斑点为矩形排布, 仿照 B.3 求

得: $a_1 = (19.7 \pm 1.8) \mu\text{m}$, $a_2 = (39.4 \pm 3.5) \mu\text{m}$.

2) UC6 和 UC7 的衍射斑点均呈平行四边形排布. 测量平行四边形的 2 条边长, 依式(22)计算出 q_1 和 q_2 模的大小. 测量平行四边形内锐角, 即得 q_1 和 q_2 间夹角 β .

标准答案: UC6 的 $a_1 = (35.5 \pm 3.2) \mu\text{m}$, $a_2 = (22.1 \pm 2.0) \mu\text{m}$, $\alpha = (63 \pm 6)^\circ$; UC7 的 $a_1 = (39.4 \pm 3.5) \mu\text{m}$, $a_2 = (35.4 \pm 3.2) \mu\text{m}$, $\alpha = (56 \pm 6)^\circ$.

C.1 旋转对称中心为 $h=0, k=0$, 旋转对称阶 $m=1, 2, 4$. 图 16 中用 1~4 标出的 4 条直线是镜像对称轴.

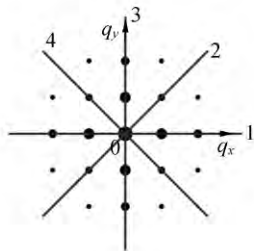


图 16 标注了镜像对称轴的衍射图

C.2 图 16 中各镜像对称轴满足的方程: 1 为 $q_y=0$, 2 为 $q_y=q_x$, 3 为 $q_x=0$, 4 为 $q_y=-q_x$.

C.3 某种对称元素存在时, 强度 $I(q_x, q_y)$ 满足的方程如下:

$$C_1: I(q_x, q_y) = I(q_x, q_y),$$

$$C_2: I(q_x, q_y) = I(-q_x, -q_y),$$

$$C_4: I(q_x, q_y) = I(-q_y, q_x),$$

$$q_y=0: I(q_x, q_y) = I(q_x, -q_y),$$

$$q_x=0: I(q_x, q_y) = I(-q_x, q_y),$$

$$q_x=q_y: I(q_x, q_y) = I(q_y, q_x),$$

$$q_x=-q_y: I(q_x, q_y) = I(-q_y, -q_x).$$

C.4 由于本题中 $\rho(x)$ 可视为实数, 结构因子存在如下关系:

$$F(-h, -k) = \iint \rho(x, y) \exp[-i(q_1 hx + q_2 ky)] dx dy = \left(\iint \rho(x, y) \exp[i(q_1 hx + q_2 ky)] dx dy \right)^* = F^*(h, k), \quad (24)$$

由此可以推出:

$$I(-h, -k) = I(h, k), \quad (25)$$

与此相应的对称性为 C_2 .

C.5 设晶体 1 的结构因子为

$$F(q_x, q_y) = \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(x, y) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy,$$

晶体 2 可以由晶体 1 对 $x=0$ 轴做镜像变换得到, 其结构因子满足:

$$f_2(q_x, q_y) = \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho_2(x, y) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy = \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(-x, y) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy = \int_{-x_0}^{x_0} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(x, y) \exp[i(-q_x x + q_y y)] d(-x) dy = F(-q_x, q_y).$$

晶体 3 可以由晶体 1 对 $y=x$ 轴做镜像变换得到, 其结构因子满足:

$$f_3(q_x, q_y) = \iint \rho_3(x, y) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy = \iint \rho(y, x) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy = \iint \rho(x, y) \exp[i(q_y x + q_x y)] dy dx = F(q_y, q_x).$$

晶体 4 可以通过晶体 1 做平移得到, 设平移矢量为 (x_1, y_1) , 其结构因子满足:

$$f_4(q_x, q_y) = \iint \rho_4(x', y') \exp[i(q_x x' + q_y y')] dx' dy' = \left\{ \iint \rho(x, y) \exp[i(q_x x + q_y y)] dx dy \right\} \cdot \exp[i(q_x x_1 + q_y y_1)] = F(q_x, q_y) \exp[i(q_x x_1 + q_y y_1)].$$

C.6 如图 17 所示, A 和 B 是晶体中的 2 个格点(完全等价). 如绕 A 点逆时针旋转角度 θ , 则 B 点变化到 C 点. 若此为晶体的对称操作, 则晶体还和原来一样. 这时再将晶体绕 A 点顺时针旋转角度 θ , 晶体会回到未做任何操作前的状态. 即, 如逆时针旋转 θ 角是对称操作, 则顺时针旋转 θ 角也必定是. 又因所有格点等价, 对 A 点成立的对 B 点也必定成立. 故, 如图 17 所示, C 和 D 必为晶体格点. CD 显然平行于 AB . 由晶体的平移对称性可以断定 CD 的长度一定是周期 a 的整数倍. 也即:

$$\cos \theta = \frac{1-n}{2}, \quad (26)$$

其中 n 为整数. 由此推出 θ 只可能取 $0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}$ 和 π , 旋转对称只能有: C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 .

C.7 各晶胞的镜像对称轴和旋转对称符号分别直接标在图 18 对应的结构图内和图下.

C.8 标准答案给出 PG1,2,5 和 8 的衍射花样的对称性见表 1,“+”表示存在相应的对称性. PG1 的 $q_x=0$ 镜像轴理论上也应该存在,但不一定能够观察到.

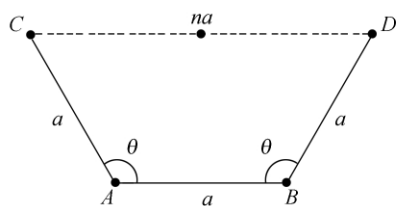


图 17 能使晶体复原的转角

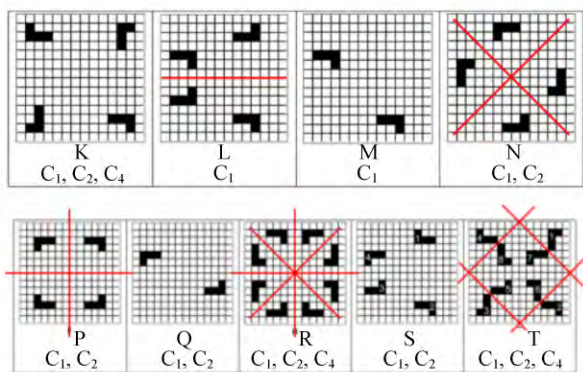


图 18 晶胞的对称性

表 1 PG1,2,5 和 8 衍射花样的对称性

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

由存在明显的 $q_y=0$ 镜像轴,推出 PG1 对应 L. 由 4 种镜像轴和 C_4 均不存在,可推出 PG2 对应 M. 由存在 $q_x=q_y$ 和 $q_x=-q_y$ 对称轴,推出 PG5 对应 N. 由存在 C_4 对称推出 PG8 对应 K.

C.9 标准答案给出的 PG3,4,6,7 和 9 衍射花样的对称性见表 2.

表 2 PG3,4,6,7 和 9 衍射花样的对称性

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

由存在 C_4 对称性可以认定 PG4 和 PG6 分别对应 R 或 T. T 中不透光“L”型单元被编号. 单元 5 可以由单元 1 对 $y=x$ 轴做镜像变换后再位移 $(-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2})$ 得到. 由 1+5 单元,再做 4 阶旋转操作可以依次得到:4+6,3+7 和 2+8 单元. 比照 C.5 的解答,可以用单元 1 的结构因子 $F(h,k)$ 表示它们的结构因子:

$$f_{1+5}(h,k) = F(h,k) + F(k,h)e^{-i(h+k)\pi},$$

$$f_{4+6}(h,k) = F(-k,h) + F(h,-k)e^{-i(h-k)\pi},$$

$$f_{3+7}(h,k) = F(-h,-k) + F(-k,-h)e^{i(h+k)\pi},$$

$$f_{2+8}(h,k) = F(k,-h) + F(-h,k)e^{i(h-k)\pi}.$$

晶胞 T 的结构因子为上面 4 项之和. 对 $h=0$ 的衍射斑点有:

$$f_T(0,k) = [F(0,k) + F(k,0) + F(0,-k) + F(-k,0)](1 + e^{ik\pi}),$$

也即当 $h=0$ 时, k 为奇数的斑点会缺失. 显然,当 $k=0$ 时, h 为奇数的斑点也会缺失. 由 PG6 衍射花样具有这样的特性,可以确定其与 T 对应. 而 PG4 不具有这样特性就只能与 R 对应.

S 晶胞的不透光“L”型单元 2,3 和 4 可以由 1 经过旋转或镜像加平移得到. 比照 C.5 的解答可以得到如下关系:

$$f_1(h,k) = F(h,k),$$

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

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

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

对于 $h=0$ 的衍射斑点, S 晶胞的结构因子为 $F_S(0,k) = [(F(0,k) + F(0,-k)](1 + e^{-ik\pi})$, 即, $h=0$ 的衍射斑点在 k 为奇数时会缺失. 类似地也可以推出: $k=0$ 的衍射斑点在 h 为奇数时会缺失. 衍射花样具有这样特性的,除 PG6 外,就只有 PG9,所以它对应 S. 这里需要指出:在对 $q_x=0$ 轴做镜像变换后,再向上平移半个周期, S 晶胞依然能复原,所以 PG9 的衍射花样也存在 $q_x=0$ 和 $q_y=0$ 的镜像对称.

PG3 有镜像对称轴,而 PG7 没有,故前者对应 P,后者对应 Q.

C.10 实验观察到 UC8 的衍射花样具有 C_{10} 旋转对称. 根据 C.6 的证明,它不可能是晶体. 实际上 UC8 是准晶,具有 C_5 对称.

D.1 0 级斑点的光场强正比于透光面积,而光强则为场强的平方. MR0 和 MR2 的总面积均

为 16 个方块,透光面积分别为 5 和 7 个方块. 16 个方块都透光时光源与屏间无任何遮挡,0 级光强就是入射光强,故:

$$I_{MR0} = \left(\frac{5}{16}\right)^2 I_0, I_{MR2} = \left(\frac{7}{16}\right)^2 I_0.$$

D. 2 标准答案所给 MR1 各衍射斑点强度见图 19.

2	5.7	19.1	1.6	24.6	15.8
1	36.5	49.2	40.2	3.0	20.8
0	2.3	20.0	336	33.5	0.9
-1	22.0	3.1	23.2	46.5	25.5
-2	2.9	23.9	2.0	38.5	7.3
	-2	-1	0	1	2
	h				

图 19 MR1 各衍射斑点的强度

考虑到透射率为实数,逆傅氏变换可写成:

$$\rho(\chi, \gamma) = \sum_{h=-2}^2 \sum_{k=-2}^2 \sqrt{I(h, k)} \cos \left[\varphi(h, k) - \frac{\pi}{2}(\chi h + \gamma k) \right], \quad (27)$$

其中, (χ, γ) 是构成晶胞方格的坐标. 将图 19 中斑点光强和图 10 中 MR0 晶胞对应斑点相位 φ 用于式(27),可得到图 20. 据此,可以判断 MR1 的晶胞应为图 9 中 X.

3	5.4	4.4	22.6	-9.7
2	-1.7	58.0	-13.5	61.1
1	6.0	49.1	61.9	-14.4
0	53.8	12.7	-7.5	5.1
	0	1	2	3
	χ			

图 20 MR1 晶胞的振幅透射率

标准答案采用的逆傅氏变换方法工作量极大,也不绝对可靠. 其实可以有更快捷的方法. MR0, MR1 和 MR2 是并排印在同一胶片上的,肉眼即可分辨出 MR1 的透光率介于 MR0 和 MR2 之间. 由 MR0 和 MR2 的透光方格数分别为 5 和 7,可推出 MR1 的透光方格数为 6,只可能是图 9 中 X 或 Z.

对衍射斑点 (h, k) , 不同透明方格间的相位差为 $\frac{h\Delta\chi + k\Delta\gamma}{2}\pi$, 其中 $(\Delta\chi, \Delta\gamma)$ 是两方格的相对坐标. 对 $(1, 1)$ 衍射斑点, $\Delta\chi + \Delta\gamma = 0, 1, 2, 3$ 时, 两方格的结构因子相位差分别是 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$. 总

共就 6 个透明方格,反相抵消,同相相加后就得到相位差为 $\frac{\pi}{2}$ 的 2 种格子数. 对低指数衍射斑点,单个透明方格的夫琅禾费衍射调制不占主导地位,可用 2 种格子数的平方和半定量地描述斑点强度. 极短时间就能得到 X 和 Z 的 $(1, 1)$ 衍射斑点强度分别为消光和很强的结论.

D. 3 标准答案所给 MR2 各衍射斑点的强度见图 21. 按照 D. 2 方法可得 MR2 各方格的试探透射率如图 22 所示.

2	2.0	43.3	45.2	39.7	8.9
1	7.2	8.5	69.8	47.9	3.2
0	8.8	11.7	508	4.7	1.7
-1	1.3	40.4	69.7	10.0	9.3
-2	1.7	56.9	25.8	54.8	1.3
	-2	-1	0	1	2
	h				

图 21 MR2 各衍射斑点的强度

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
	χ			

图 22 MR2 晶胞的透射率

比较图 22 与 MR0 晶胞结构,只有 $(0, 3)$ 和 $(2, 0)$ 方格变成透光. 因此,推测 MR2 具有形如图 23 的晶胞结构.

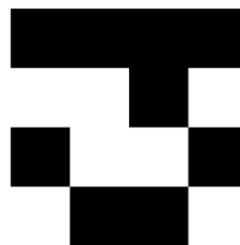


图 23 MR2 晶胞结构

也可以利用在 D. 2 建议过的方法来确定 MR2 的结构. 对 $(0, 2)$ 衍射斑点,同行方格结构因子的相位相同,相邻行方格结构因子的相位相反. MR0 只要第 1 行(从上往下)或第 3 行再增加 1 个透明方格,则 6 个透明方格的结构因子为

0,第7个透明方格无论在什么位置都得不到衍射斑.所以,可以排除新增的2个透明格子出现在第1和第3行的可能.在图24中,直接将这些格子涂黑,并用白底表示已知透明的方格.

MR0的5个透明方格的 $(1,1)$ 衍射斑点结构因子两两抵消,只余下1个坐标为 $(1,2)$ [或 $(2,1)$]的.新增的2个透明方格中任何一个的相位都不能与其相反,否则得不到强斑 $(1,1)$.由此可排除图24中X.

如新增的透明方格之一为Y,则 $(-1,1)$ 衍射斑点必不弱,故图24中Y也不可能透明.新增加

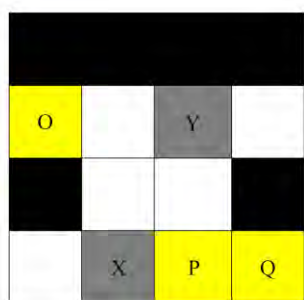


图24 MR2结构分析示意图

的透明方格只有OP,OQ和PQ3种可能.由于各方格间只有同相、正交和反相3种关系,估计1个衍射斑点强度只需数秒时间.MR2衍射花样的1个明显特征是 $(1,-2)$ 斑点强度明显强于 $(0,-2)$ 的,只有OQ组合才与此相符.

3 结束语

本次竞赛试题借助不同类型的光栅衍射,相当完整地展示了晶体学的主要物理内容,非常难得.试题中安排的任务也能比较全面地考察选手的学习能力、洞察能力和动手能力.但试题的任务量确实太大,要全部完成几乎不可能.中国队的张意飞得14.94分已经非常了不起.

参考文献:

- [1] IdPhO-2020-E1: Crystallography, Daniil Vakhrameev, Valentin Borshchevskiy and Fedor Tsybrov [EB/OL]. [2021-03-11]. <https://i20.mipt.ru>.
- [2] 郭旭波,蒋硕,安宇,等.第50届国际物理奥林匹克竞赛实验试题2介绍与解答[J].物理实验,2020,40(2):40-46.

Problems and solutions of the 2020 International Physics Olympiad experimental exam

XUN Kun, LI Zhi, MU Liang-zhu, CHEN Zhi-jian, CHEN Xiao-lin
(School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract: The 2020 International Physics Olympiad experimental exam was about “crystallography”. Starting from one-dimensional grating, the contestants were guided to find the relationship between diffraction pattern and crystal structure. They were asked finally to determine the structures of unknown crystals in the exam. This paper introduced the content of the exam and the standard solutions provided by the organizing committee in detail. The solutions different from the standard ones were also provided in some cases.

Key words: International Physics Olympiad; crystallography; unit cell; structure factor; symmetry; diffraction

[责任编辑:任德香]