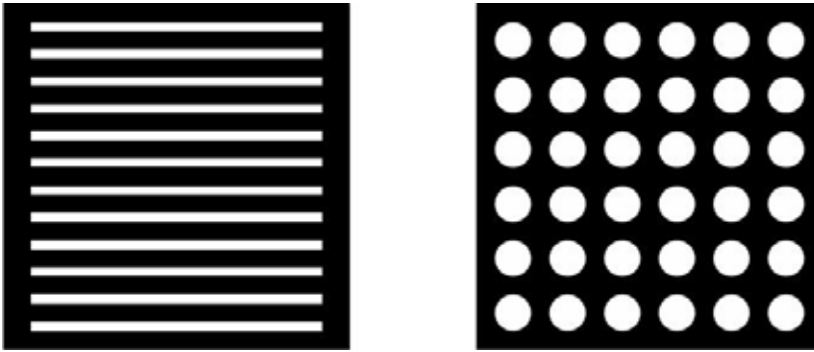


第五章 衍射光栅

如果光波在其传播路径上遇到某种障碍物，则将产生衍射，从一般意义上，光路上障碍物被定义为衍射屏。衍射屏的作用，就是破坏原有自由空间的波前并重新构建波前，从而使光波场，即衍射场重新分布，前面讨论的具有圆孔、单缝、矩孔等空间结构的障碍物都是衍射屏。

除了上述结构简单的衍射屏之外，还有许多空间结构比较复杂的衍射屏，例如，具有多条狭缝或多个圆孔的衍射屏。



在种种结构复杂的衍射屏中，有一类是具有空间周期性结构的，其衍射的结果又比较简单的规律，而且容易进行数学上的分析，所以获得了很广泛的应用。这种衍射屏就是衍射光栅。

衍射光栅：具有周期性空间结构或光学结构的衍射屏。

衍射光栅可以具有反射或透射结构，可以按不同的透射或反射率分为黑白光栅、正弦光栅，等等。这类光栅由于使透射光或反射光的振幅改变，因而统称为振幅光栅。

还有一类光栅，对于入射光而言，是全透或全反的，但是透射光或反射光的相位将被改变，因而被称作相位光栅。

5.1 多缝夫琅和费衍射

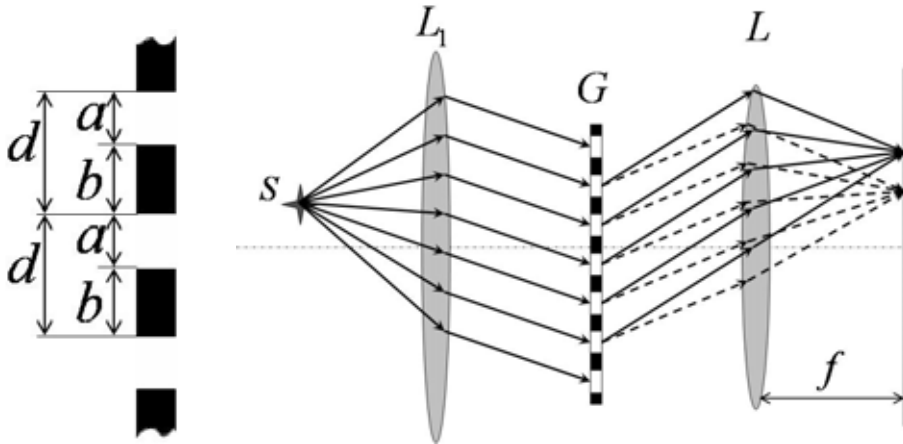
在一个不透光的屏上，周期性地分布着一系列透光狭缝，这就是一种最简单的平面型透射式光栅。相邻两缝的距离为 d ，狭缝的宽度为 a ，不透光部分的宽度为 b ，则 $a+b=d$ ， d 是光栅的空间结构周期，称作光栅常数。由于这类光栅指在一个方向上具有周期性结构，所以是一种一维光栅。

采用夫琅和费衍射方式，平行光向光栅入射，光栅之后，有一焦距为 f 的汇聚透镜，将衍射光汇聚到位于透镜焦平面处的接收屏上。

5.1.1 衍射强度

在讨论单缝衍射时，我们曾经指出，如果单缝沿着衍射屏平移，而衍射装置的其它部分保持不变，则衍射的强度分布将不发生改变，因为位于透镜焦平面上的光强只与衍射光的方向有关。因而，对于多缝衍射屏来说，其中每一个单缝，即每一个衍射单元在接收屏上所产生的衍射条纹都是相同的。

但是，来自不同狭缝的光，由于是相干的，因而相互之间也要进行相干叠加，实际上是一种干涉过程，而不是简单的光强相加。对于衍射光栅来说，既有来自每一个衍射单元的波列各自的衍射，也有不同单元波列之间的干涉。

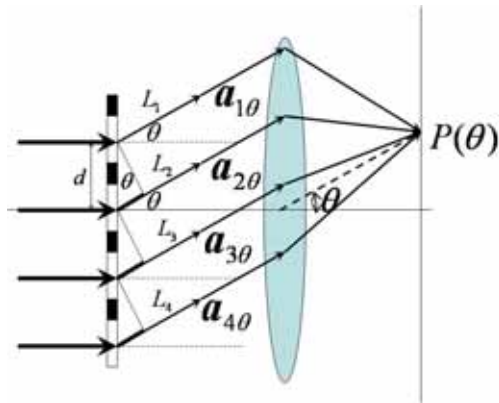


对于光栅的每一个单元，按衍射分析；不同的单元之间，按干涉分析。

可以采用振幅矢量方法或者记分方法求的衍射强度分布，以下分别加以说明。

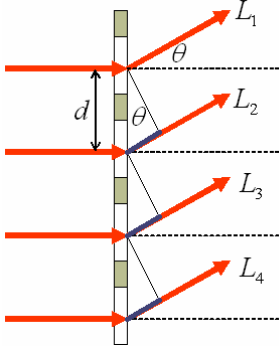
1. 用矢量法分析

沿着与光轴夹角为 θ 方向的衍射光，经过透镜后，都将汇聚到焦平面上的 P 点。P 点的方位角可以由透镜成像的规律得到，如图所示，就是 θ 。每一个衍射单元的复振幅可以用一个矢量表示，记为 $\tilde{a}_{n\theta}$ 。



相邻两个单元的衍射矢量间具有位相差 $\Delta\varphi$

所有单元衍射的矢量和为光栅衍射的复振幅。

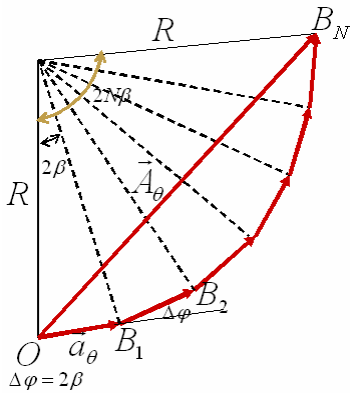


设第 n 个狭缝的中心到 P 点的光程为 L_n ，由图上可以看出，

$$L_2 = L_1 + d \sin \theta, \dots, \text{即 } L_n = L_1 + (n-1)d \sin \theta$$

相邻衍射单元间的光程差 $\delta = d \sin \theta$

$$\text{相邻衍射单元间的位相差, } \Delta\varphi = kd \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} d \sin \theta$$



$$\text{记 } 2\beta = \Delta\varphi, \text{ 则 } \beta = \frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta,$$

设光栅共有 N 条狭缝，则合矢量就是 N 个单元衍射的矢量相加。将 N 个矢量依次首尾相接，而且第 n 个矢量相对于第 $n-1$ 个矢量转过 $\Delta\varphi$ ，即 2β 角。如图，

$$\vec{A}_\theta = \vec{a}_{1\theta} + \vec{a}_{2\theta} + \vec{a}_{3\theta} + \dots + \vec{a}_{n\theta}$$

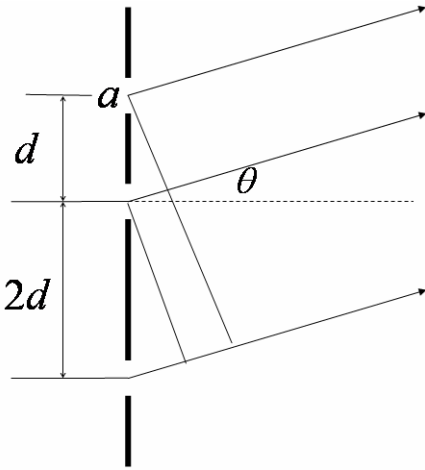
$$A_\theta = OB_N = 2R \sin N\beta = 2 \frac{a_\theta / 2}{\sin \beta} \sin N\beta = a_\theta \frac{\sin N\beta}{\sin \beta}$$

用复振幅表示为 $\tilde{U}_\theta = \tilde{U}_0 \frac{\sin u}{u} \frac{\sin N\beta}{\sin \beta}$

衍射光强为 $I_\theta = I_0 \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta}\right)^2$

例题

5.1 . 三条平行狭缝，宽为 a ，缝距分别为 d 和 $2d$ ，求正入射时夫琅和费衍射分布



用矢量方法求解

如图，三个等长矢量， $A = U_0 \frac{\sin u}{u}$ ，夹角依次为 $\Delta\varphi$ 、 $2\Delta\varphi$ ，

$$\Delta\varphi = kd \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} d \sin \theta = 2\beta$$

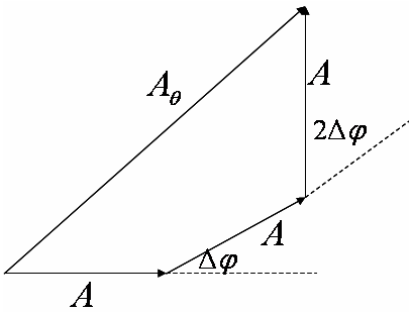
合矢量为 A_θ ，分量为

$$A_{\theta x} = A + A \cos \Delta\varphi + A \cos(3\Delta\varphi) \quad A_{\theta y} = A \sin \Delta\varphi + A \sin(3\Delta\varphi)$$

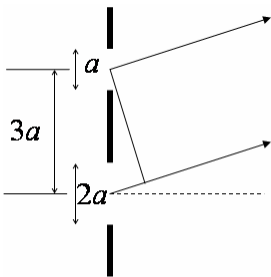
$$A_\theta^2 = A_{\theta x}^2 + A_{\theta y}^2 = [A + A \cos \Delta\varphi + A \cos(3\Delta\varphi)]^2$$

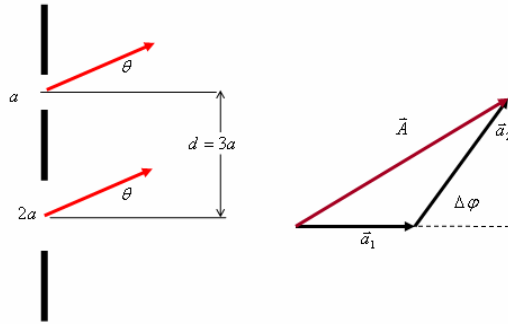
$$+ [A \sin \Delta\varphi + A \sin(3\Delta\varphi)]^2$$

$$\begin{aligned}
 &= A^2 + A^2 \cos^2 \Delta\varphi + A \cos^2(3\Delta\varphi) + 2A^2 \cos \Delta\varphi + 2A^2 \cos 3\Delta\varphi \\
 &+ 2A^2 \cos \Delta\varphi \cos 3\Delta\varphi \\
 &+ A^2 \sin^2 \Delta\varphi + A^2 \sin^2(3\Delta\varphi) + 2A^2 \sin \Delta\varphi \sin(3\Delta\varphi) \\
 &= 3A^2 + 2A^2 \cos \Delta\varphi + 2A^2 \cos 3\Delta\varphi + 2A^2 \cos 2\Delta\varphi \\
 &= A^2 [3 + 2 \cos \Delta\varphi + 2 \cos 2\Delta\varphi + 2 \cos 3\Delta\varphi] \\
 &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [3 + 2 \cos 2\beta + 2 \cos 4\beta + 2 \cos 6\beta]
 \end{aligned}$$



5.2 . 导出不等宽双狭缝的夫琅和费衍射强度分布公式，缝宽分别为 a 和 $2a$ ，缝距 $d=3a$ 。





矢量方法解：

对于每个单缝，单元衍射因子分别为

$$\vec{a}_1(\theta) = U_0 \frac{\sin u}{u}, \quad \vec{a}_2(\theta) = 2U_0 \frac{\sin 2u}{2u}, \quad \text{其中 } u = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta$$

沿 θ 方向的衍射光，两缝的光程差 $\delta = d \sin \theta = 3a \sin \theta$ ，位相差 $\Delta\varphi = 3ka \sin \theta = 3 \frac{2\pi}{\lambda} a \sin \theta = 6u$ ，则两矢量的夹角为 $\Delta\varphi$ 。合矢量为

$$\begin{aligned} A^2 &= a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2 \cos(\pi - \Delta\varphi) \\ &= (U_0 \frac{\sin u}{u})^2 + (2U_0 \frac{\sin 2u}{2u})^2 + 4U_0^2 \frac{\sin u}{u} \frac{\sin 2u}{2u} \cos 6u \\ &= (U_0 \frac{\sin u}{u})^2 [1 + 4 \cos^2 u + 4 \cos u \cos 6u] \end{aligned}$$

即光强为 $I = I_0 (\frac{\sin u}{u})^2 [1 + 4 \cos^2 u + 4 \cos u \cos 6u]$ ，其中 $u = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta$ 。

或者将宽度为 $2a$ 的狭缝作为两个宽度为 a 的狭缝，采用三个矢量叠加的方法，可以得到相同的结果。

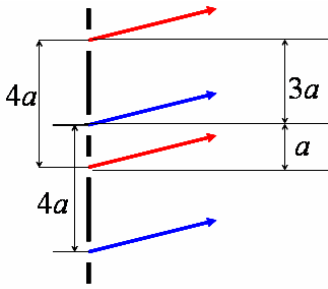
5.3 .2N 条平行狭缝，缝宽为 a ，缝间不透明部分周期性变化，间距 $a, 3a, a, 3a, \dots$ ，求下列各种情形的衍射强度分布（1）遮住偶数条；（2）遮住奇数条；（3）全开放

（1）（2）两种情形相当于单周期光栅衍射。

（3）有两套光栅常数为 $d=4a$ 的光栅，相互错开 a 。第一套

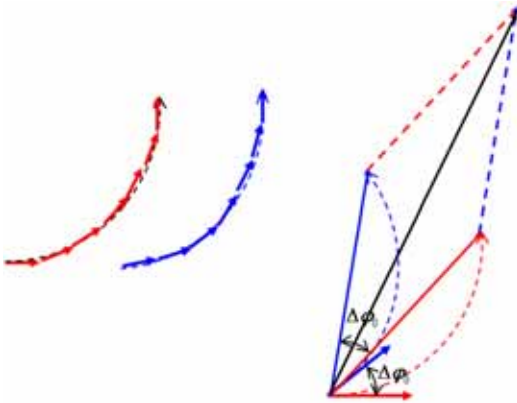
$$L_j = L_1 + (j-1)(4a \sin \theta)$$

$$\text{第二套 } L'_j = L'_1 + (4a \sin \theta) = L_1 + a \sin \theta + (j-1)(4a \sin \theta)$$



矢量方法：有两套相同的矢量各自相加，其中对应的矢量间有夹角 $\Delta\varphi_0, \Delta\varphi_0 = ka \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} a \sin \theta = 2u$ 。各自合成的结果为 $A_1(\theta), A_2(\theta)$ ，两者之间的位相差为 $\Delta\varphi_0$ 。这两个矢量的和为

$$A^2 = A_1^2(\theta) + A_2^2(\theta) + 2A_1(\theta)A_2(\theta)\cos \Delta\varphi_0 = A_1^2(\theta)[2 + 2\cos 2u]$$



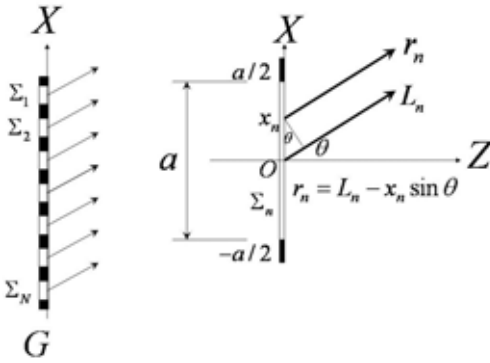
2. 用 Fresnel-Kirchhoff 衍射积分求解

平行光入射，满足近轴条件，倾斜因子 $F(\theta_0, \theta) = 1$ ， $\frac{1}{r}$ 为常数，记为 $\frac{1}{r_0}$ 。

$$\tilde{U}(P) = K \iint_{\Sigma} \tilde{U}_0(Q) F(\theta_0, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} d\Sigma = K \frac{1}{f} \iint_{\Sigma} \tilde{U}_0(Q) e^{ikr} d\Sigma$$

瞳函数 $\tilde{U}_0(Q)$ 具有周期性的数值，透光部分， $\tilde{U}_0(Q) = \tilde{U}_0(0)$ ；不透光部分的 $\tilde{U}_0(Q) = 0$ ，所以仅对衍射屏透光部分求积分，有

$$\begin{aligned}\tilde{U}(P) &= \frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \left[\int_{\Sigma_1} e^{ikr_1} d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} e^{ikr_2} d\Sigma_2 + \cdots + \int_{\Sigma_N} e^{ikr_N} d\Sigma_N \right] \\ &= \frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Sigma_n} e^{ikr_n} d\Sigma_n \right]\end{aligned}$$



对每一个狭缝的积分是求得入射光经该狭缝后的衍射在 P 点引起的振动，即复振幅，为光的衍射；对所有狭缝的求和是将每一个狭缝射出的光在 P 点引起的振动即复振幅进行叠加，自然是相干叠加，为光的干涉。物理过程为：每一个单狭缝的光在 P 点先进行衍射，衍射后的复振幅再进行干涉。

在第 n 个狭缝中，位置在 x_n 的点光源发出的光与狭缝中心发出的光到达 P 点的光程差为 $\Delta r_n = -x_n \sin \theta$ ，即 $r_n = L_n - x_n \sin \theta$ ，上述积分化为

$$\begin{aligned}\tilde{U}(P) &= \frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \sum_{n=1}^N \int_{-a/2}^{a/2} e^{ikr_n} dx_n = \frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \sum_{n=1}^N \int_{-a/2}^{a/2} e^{ikL_n - ikx_n \sin \theta} dx_n \\ &= \left[\frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx \sin \theta} dx \right] \left[\sum_{n=1}^N e^{ikL_n} \right] = \left[K \frac{\tilde{U}_0(0)}{f} a \frac{\sin u}{u} \right] \left[\sum_{n=1}^N e^{ikL_n} \right]\end{aligned}$$

$\frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx \sin \theta} dx$ 就是单缝衍射的复振幅，而 $\sum_{n=1}^N e^{ikL_n}$ 就是多光束干涉

的结果。

$$\frac{K\tilde{U}_0(0)}{f} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx \sin \theta} dx = \frac{Ka\tilde{U}_0(0)}{f} \frac{\sin u}{u} = \frac{Ka\tilde{U}_0(0)}{f} \frac{\sin\left(\frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta\right)}{\frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta}$$

为单元（单缝）衍射因子，由瞳函数决定。

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N e^{ikL_n} &= \sum_{n=1}^N e^{ik(n-1)d \sin \theta} = \sum_{n=0}^{N-1} e^{inkd \sin \theta} = \frac{1 - e^{2iN \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta}}{1 - e^{2i \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta}} = \frac{e^{iN\beta} e^{-iN\beta} - e^{iN\beta}}{e^{i\beta} e^{-i\beta} - e^{i\beta}} \\ &= e^{i(N-1)\beta} \frac{\sin(N\beta)}{\sin \beta} = e^{i(N-1)\beta} N(\theta) \end{aligned}$$

其中 $\beta = kd \sin \theta = \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta$

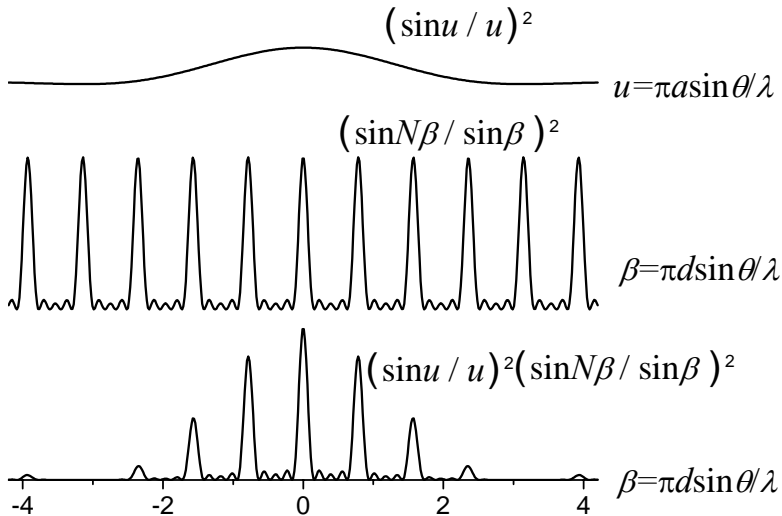
$N(\theta)$: N 元干涉因子。

最后得到

$$\tilde{U}(P) = \tilde{U}_0 U(\theta) e^{i\varphi(\theta)} N(\theta)$$

衍射光强为

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



例题

1. 积分方法 $L_2 = L_1 + d \sin \theta$, $L_3 = L_1 + 3d \sin \theta$, $r_j = L_j - x \sin \theta$

$$\begin{aligned}\tilde{U}(P) &= KF \left[\int_{\Sigma_1} \tilde{U}_0 \frac{e^{ikr}}{r} dx + \int_{\Sigma_2} \tilde{U}_0 \frac{e^{ikr}}{r} dx + \int_{\Sigma_3} \tilde{U}_0 \frac{e^{ikr}}{r} dx \right] \\ &= KF \tilde{U}_0 a \frac{\sin u}{u} \left[\frac{e^{ikL_1}}{r_0} + \frac{e^{ikL_2}}{r_0} + \frac{e^{ikL_2}}{r_0} \right] = KF \tilde{U}_0 a \frac{\sin u}{u} \frac{e^{ikL_1}}{r_0} [1 + e^{ik(L_2-L_1)} + e^{ik(L_3-L_1)}] \\ &= KF \tilde{U}_0 a \frac{\sin u}{u} \frac{e^{ikL_1}}{r_0} [1 + e^{ikd \sin \theta} + e^{i3kd \sin \theta}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{强度分布 } I(\theta) &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 |1 + e^{ikd \sin \theta} + e^{i3kd \sin \theta}|^2 \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [3 + e^{i2\beta} + e^{i6\beta} + e^{-i2\beta} + e^{-i6\beta} + e^{i4\beta} + e^{-i4\beta}] \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [3 + 2 \cos 2\beta + 2 \cos 4\beta + 2 \cos 6\beta] \end{aligned}$$

2 .

解法一、

两缝中心发出的沿 θ 方向光的光程为 L_1 和 L_2 , 有 $L_2 = L_1 + d \sin \theta$,

$$r_j = L_j - x \sin \theta ,$$

$$\tilde{U}(P) = KF \left[\int_{\Sigma_1} \tilde{U}_0 \frac{e^{ikr}}{r} dx + \int_{\Sigma_2} \tilde{U}_0 \frac{e^{ikr}}{r} dx \right] = KF \tilde{U}_0 \left[\frac{e^{ikL_1}}{r_0} a_1 \frac{\sin u_1}{u_1} + \frac{e^{ikL_2}}{r_0} a_2 \frac{\sin u_2}{u_2} \right]$$

=

$$KF \tilde{U}_0 a \frac{e^{ikL_1}}{r_0} \left[\frac{\sin u}{u} + 2e^{ikd \sin \theta} \frac{2 \sin u \cos u}{2u} \right] = KF \tilde{U}_0 a \frac{e^{ikL_1}}{r_0} \frac{\sin u}{u} [1 + 2e^{ikd \sin \theta} \cos u]$$

$$\text{强度分布 } I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [1 + 4 \cos^2 u + 2 \cos u * 2 \cos(kd \sin \theta)]$$

$$= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [1 + 4 \cos^2 u + 2 \cos u * 2 \cos 6u]$$

解法二、将第二缝分为缝宽为 a 的两狭缝 , 三缝中心间隔为 $d_1=(5/2)a$ 和 $d_2=a$ 。

相应地 $L_2 = L_1 + d_1 \sin \theta$, $L_3 = L_1 + (d_1 + d_2) \sin \theta$ 。

$$\begin{aligned} \tilde{U}(P) &= KF a \tilde{U}_0 \frac{1}{r_0} [e^{ikL_1} + e^{ikL_2} + e^{ikL_3}] \frac{\sin u}{u} = KF a \tilde{U}_0 \frac{e^{ikL_1}}{r_0} [1 + e^{ik(L_2-L_1)} + e^{ik(L_3-L_1)}] \frac{\sin u}{u} \\ &= KF a \tilde{U}_0 \frac{e^{ikL_1}}{r_0} [1 + e^{ikd_1 \sin \theta} + e^{ik(d_1+d_2) \sin \theta}] \frac{\sin u}{u} \end{aligned}$$

强度分布

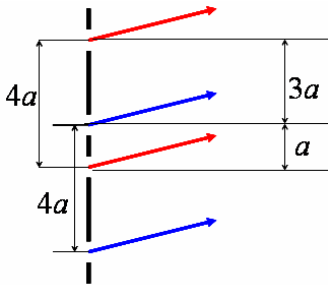
$$\begin{aligned} I(\theta) &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \left| 1 + \exp\left(\frac{5}{2} ika \sin \theta\right) + \exp\left(\frac{7}{2} ika \sin \theta\right) \right|^2 \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [1 + 1 + 1 + \exp\left(\frac{5}{2} ika \sin \theta\right) + \exp\left(-\frac{5}{2} ika \sin \theta\right) \\ &\quad + \exp\left(\frac{7}{2} ika \sin \theta\right) + \exp\left(-\frac{7}{2} ika \sin \theta\right) + \exp\left(\frac{2}{2} ika \sin \theta\right) + \exp\left(-\frac{2}{2} ika \sin \theta\right)] \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [3 + 2 \cos 5u + 2 \cos 7u + 2 \cos 2u] \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [3 + 2 \cos u * 2 \cos 6u + 4 \cos^2 u - 2] \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 [1 + 4 \cos^2 u + 2 \cos u * 2 \cos 6u] \end{aligned}$$

3 . (1) (2) 两种情形相当于单周期光栅衍射。

(3) 有两套光栅常数为 $d=4a$ 的光栅 , 相互错开 a 。 第一套

$$L_j = L_1 + (j-1)(4a \sin \theta)$$

第二套 $L'_j = L'_1 + (4a \sin \theta) = L_1 + a \sin \theta + (j-1)(4a \sin \theta)$



$$\begin{aligned}\tilde{U}(P) &= \int_{\Sigma} () dx + \int_{\Sigma'} () dx = KF\tilde{U}_0 \frac{1}{r_0} \frac{\sin u}{u} \left[e^{ikL_1} \frac{\sin N\beta}{\sin \beta} + e^{ikL_1 + ika \sin \theta} \frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right] \\ &= KF\tilde{U}_0 \frac{1}{r_0} \frac{\sin u}{u} e^{ikL_1} \frac{\sin N\beta}{\sin \beta} [1 + e^{ika \sin \theta}]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{强度分布 } I(\theta) &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2 |1 + e^{ika \sin \theta}|^2 \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2 [2 + e^{ika \sin \theta} + e^{-ika \sin \theta}] \\ &= I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)^2 [2 + 2 \cos(ka \sin \theta)] = I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \\ &\quad \left(\frac{\sin 4Nu}{\sin 4u} \right)^2 [1 + \cos 2u]\end{aligned}$$

$$\text{其中 } u = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta, \quad \beta = 4u$$

5.1.2 双缝衍射

如果光栅只有两条狭缝， $N=2$ ，衍射光强为

$$I(P) = 4I_0 \cos^2 \beta \frac{\sin^2 u}{u^2},$$

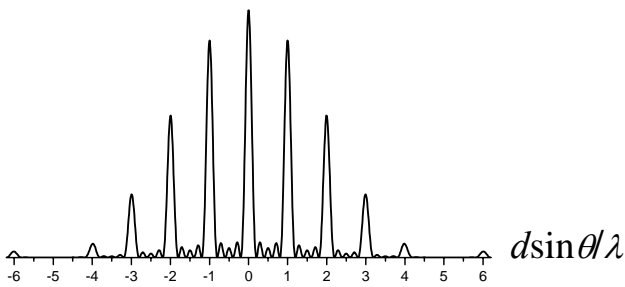
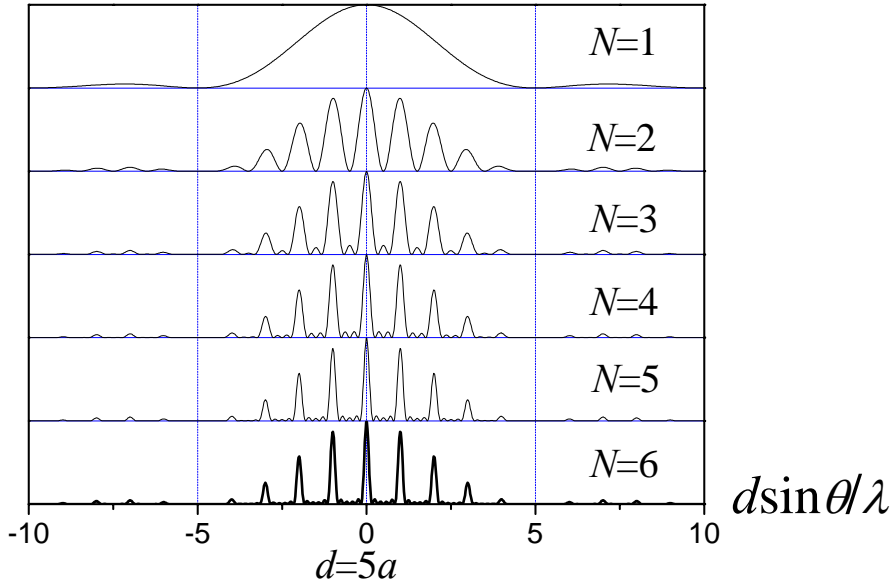
而杨氏干涉为

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

两者相差衍射因子 $\frac{\sin^2 u}{u^2}$ ，这当然是由于杨氏干涉中不考虑单缝衍射的结果。

或者，认为在杨氏干涉装置中 $\frac{\sin u}{u} = 1$ ，则必须有 $u = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta = 0$ ，只有在 $a \ll \lambda$ 条件下才能实现。也就是说，在杨氏干涉实验中，每一个狭缝本身的宽度比光的波长要小得多，这种情况相当于每一个狭缝、或者针孔中只有一个次波源。

5.1.3 衍射花样的特点



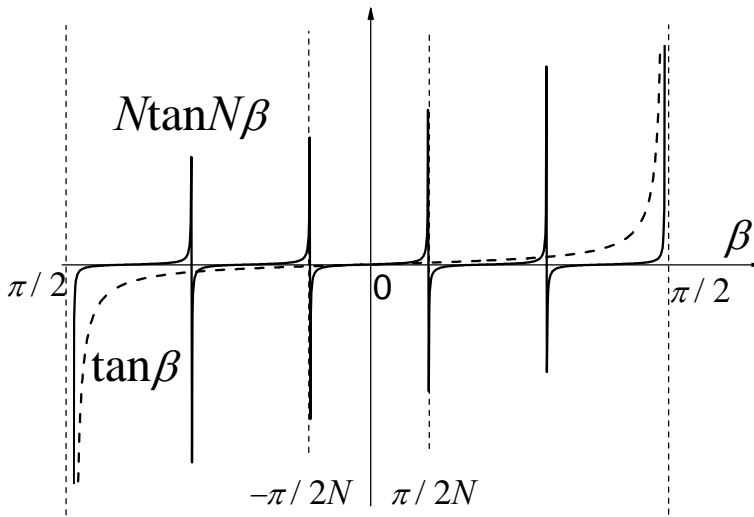
由图可以看出，因为衍射强度是单元衍射和 N 原干涉的乘积，总的光强是由一系列细锐的衍射峰组成，包括主极大和次极大。

极值是由缝间干涉因子 $N(\theta) = \frac{\sin N\beta}{\sin \beta}$ 决定，对 $N(\theta)$ 求微分，即可得到取

极值的位置。

$$N(\theta)' = \left(\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} \right)' = \frac{N \cos N\beta \sin \beta - \cos \beta \sin N\beta}{\sin^2 \beta} = 0$$

$N \tan \beta = \tan(N\beta)$ 这是一个超越方程，可以从图中看出，在每一个 $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ 区间内，除去 $N-1$ 个位于 $(2m+1)\frac{\pi}{2N}$ 奇点之外，共有 $N-1$ 个解，都是极大值点。



1. 衍射极大值位置

$\beta = j\pi$ 为超越方程 $N \tan \beta = \tan(N\beta)$ 的一组解，此时 $N(\theta)$ 取极大值，

$$N(\theta) = N, \text{ 光强 } I = N^2 I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2,$$

$$\text{而 } \beta = \frac{\pi d \sin \theta}{\lambda}, \text{ 所以 } d \sin \theta = j\lambda, j=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

每一个主极大值代表接收屏上的一根亮条纹，因而有一系列的亮条纹，衍射光谱线。 j 为谱线级数。

谱线位置与 N 无关，由 d, j, λ 决定。

谱线位置与衍射因子无关。

谱线强度与 N^2 成正比，受衍射因子调制。

2. 极小值位置

当衍射因子或缝间干涉因子为 0 时，强度都是极小值。

要使 $\frac{\sin u}{u} = 0$ ，只有 $\sin u = 0$ ，同时 $u \neq 0$ ，即 $u = n\pi$ ， $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ ，

而 $u = \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}$ ，于是到

$$a \sin \theta = n\lambda, n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

要使干涉因子 $\frac{\sin N\beta}{\sin \beta} = 0$ ，必须 $\sin N\beta = 0$ ，同时 $\sin \beta \neq 0$ ，即

$d \sin \theta = \frac{j}{N} \lambda$ ， $j = 1, 2, \dots, N-1, N+1, \dots$ ，可以列表表示为

$$d \sin \theta = \boxed{0}, \frac{\lambda}{N}, \frac{2\lambda}{N}, \dots, \frac{(N-1)\lambda}{N}; \boxed{\lambda}, \frac{(N+1)\lambda}{N}, \dots, \frac{(2N-1)\lambda}{N}; \boxed{2\lambda}, \dots$$

3. 次极大值

在任意两个主极大值 $d \sin \theta_j = j\lambda$ ， $d \sin \theta_{j+1} = (j+1)\lambda$ 之间，有 $N-1$ 个极小值；而每两个极小值之间有一个次极大值，所以每两个主极大值之间还有 $N-2$ 个次极大值。次极大值的位置由超越方程 $N \tan \beta = \tan(N\beta)$ 的另一组解所决定。

4. 谱线的缺级

在干涉的极大值与衍射的极小值重合的位置，由于干涉的极大值不能出现而产生缺级。

干涉极大位置 $d \sin \theta = j\lambda$ ，衍射极小位置 $a \sin \theta = n\lambda$ ，所以缺级条件为

$j/d = n/a$ ，即 $j = n \frac{d}{a}$ ， $n \neq 0$ 。具有上述级数的谱线由于衍射而缺失。

5.1.4 干涉与衍射的区别和联系

干涉和衍射都是波的相干叠加，因而其物理本质都是相同的，所以，无论是应用广的叠加原理还是采用惠更斯—菲涅耳衍射积分公式，都遵循振动矢量叠加的原理。如果仅从这一点来看的话，实在没有必要将干涉和衍射加以区分。之所以区分，无非是基础以下几种考虑；

其一、从实验所采用的装置和方法看，两者有区别；

其二、从采用的数学手段上看，两者有区别；

其三、从物理结果上看，两者有区别。

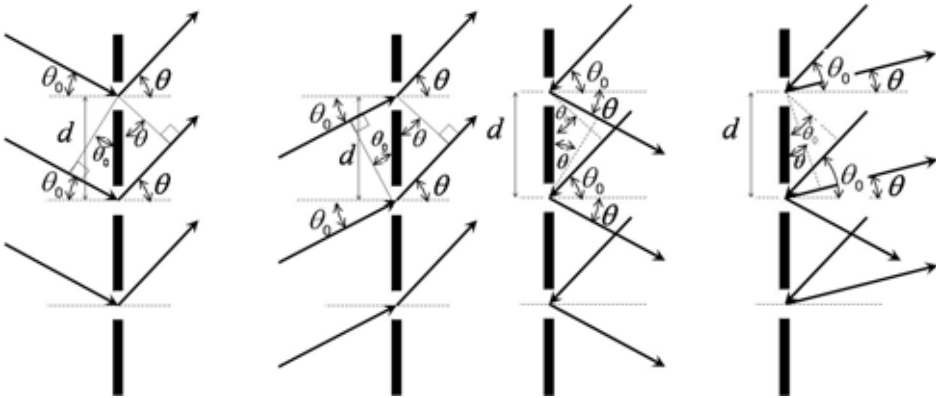
干涉是“光束”之间的相干叠加，因而要求每一条“光束”都要足够细，因而，样式干涉实验装置中，每一个狭缝或针孔都要足够小，以至于可以认为其中仅包含有一个振动源。这些光束是有限条，或虽然有无限多条，但是光束之间是离散的、不连续的、可数的。

而衍射则是连续分布的无限多个点光源（次波中心）发出的光波的相干叠加。所以每一个衍射单元可以比较大，例如菲涅耳圆孔、夫琅和费单缝、圆孔、矩孔等等，其中每一个衍射单元中包含有许多（无限多）个扰动源。

由于干涉的“光束”是离散的，因而其叠加的过程可以在数学上用求和的方法解决，既可以应用波的叠加原理；而衍射的扰动源是连续分布的，则在数学上必须采用积分（曲面积分）的方法求解，所以需要求解菲涅耳——基尔霍夫衍射积分公式。

从最后的效果看，干涉之后光的能量在空间均匀分布，无论杨氏干涉还是薄膜干涉，各级亮条纹有相差不大空间角宽度和强度；而衍射所产生的一系列亮条纹中，有一个条纹具有较大的强度和角宽度，例如夫琅和费圆孔衍射的爱里斑、单缝衍射的零级条纹，这个特殊的衍射级就是系统的几何像点上，因而衍射的结果更接近于几何成像的情况，或者，几何光学就是衍射的零级近似。

5.1.5 光栅方程



前面推导光栅衍射的复振幅及强度分布时，为了表达简单，假设入射光是沿着平行于系统的光轴方向入射的。实际上，入射光可以沿任意方向，设入射光与系统光轴的夹角为 θ_0 ，如图所示，则对于透射式光栅

斜入射时

$$\text{光程差 } \delta = -d(\sin \theta_0 \pm \sin \theta) = j\lambda$$

入射、出射在光栅平面法线同侧， $d(\sin \theta_0 + \sin \theta) = j\lambda$

入射、出射在光栅平面法线同侧， $d(\sin \theta_0 - \sin \theta) = j\lambda$

反射式光栅

$d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = j\lambda$ ，同侧取“+”，异侧取“-”。

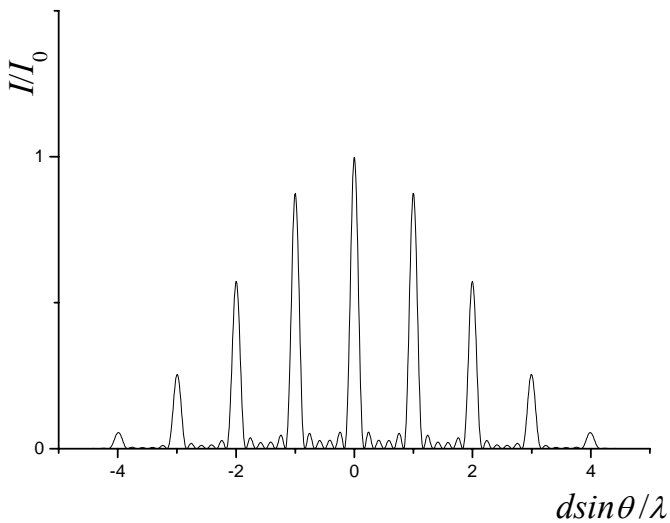
正入射时

$d \sin \theta = j\lambda$ ， $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

5.2 光栅光谱

由光栅方程 $d \sin \theta = j\lambda$ 可以看出，一方面，对于单色光，经过衍射，不同的衍射级次具有不同的衍射角；另一方面，对于复色光（通常所说的白光），在同一级衍射谱中，不同的波长具有不同的衍射角，即 $\theta = \theta(\lambda) = \arcsin(j\lambda/d)$ ，即光栅具有色散能力。

5.2.1 谱线的角宽度和光栅的色分辨本领



1. 谱线的角宽度

对于单色光，每一级光谱线，在空间都有一定的角宽度，通常用谱线的极大值与相邻极小值的角度差表示谱线的角宽度，有时也称作“半角宽度”。极大值的位置由光栅方程决定，为 $\sin \theta_j = j \frac{\lambda}{d}$ ，

而相邻的最小值出现在 $\sin \theta'_j = (j + \frac{1}{N}) \frac{\lambda}{d}$ 处， $\theta'_j = \theta_j + \Delta \theta_j$

因而有 $\sin \theta'_j - \sin \theta_j = \cos \theta_j \Delta \theta_j = \frac{\lambda}{Nd}$ ，可得

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

$L=Nd$ ，就是光栅的宽度。

光谱线的角宽度与光栅的有效宽度成反比，也与衍射角有关，衍射角大，则角宽度也较大。但是，由于系统基本上都满足近轴条件，也就是说，通常都是小角度衍射，因而衍射角度对谱线的角宽度的影响并不大。

2. 光栅的分辨本领

入射光是白光，则同一级衍射谱中，不同的波长成分有不同的衍射角。

设波长差为 $\delta \lambda$ 的同级衍射光谱线的角距离为 $\delta \theta$ ，则由光栅方程

$$d \sin \theta = j \lambda$$
，可以得到

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

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

用 Rayleigh 判据， $\delta \theta \geq \Delta \theta$ 时，可以认为 λ 与 $\lambda + \delta \lambda$ 的谱线是可以分辨的，

因而 $j \frac{\delta \lambda}{d \cos \theta} \geq \frac{\lambda}{Nd \cos \theta}$ ，可分辨的最小波长间隔为

$$\delta \lambda = \frac{\lambda}{jN}$$

一般用分辨本领表示光栅对不同波长光谱线的分辨能力，分辨本领的定义是

$$A = \frac{\lambda}{\delta \lambda} = jN$$

分辨本领是针对波长的分辨，因而也称作色分辨本领。

N 越大， j 越大，分辨本领越大；分辨本领与光栅常数 d 无关。

5.2.2 光栅的色散与自由光谱范围

1. 光栅的色散

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

1) $d\theta/d\lambda$ ，角色散率，光栅的分光能力。

定义为：两条纯数学的光谱线在空间分开的角距离。

由光栅方程，可以得到

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

(1) $j = 0$ ， $d\theta/d\lambda = 0$ ，零级光谱无色散，即所有不同波长的零级光谱线都集中于同一位置。原因是零级谱的干涉的光程差等于零。

(2) θ 很小时， $d\theta/d\lambda = j/d$ ，对于固定的衍射级数 j ，角色散率为常数。

角色散率与 N 无关。

2) 线色散率 $dl/d\lambda$ ，光谱线在焦平面上分开的距离。

$$dl/d\lambda = fd\theta/d\lambda$$

2. 光栅的量程

由光栅方程 $d \sin \theta = j\lambda$ 或 $d(\sin \theta \pm \sin \theta_0) = j\lambda$ 可以看出，由于 $|\sin \theta| < 1$ ，所以 $\lambda < d \sin \theta / j < d$ ，波长大于光栅常数的光不满足光栅方程，因而光栅的量程，即可以测量的最长波长为 d 。

3. 自由光谱范围

将入射光的波长范围表示为 $\lambda_m \sim \lambda_M = \lambda_m + \Delta\lambda$ ，

则衍射后有

$$d \sin \theta_m(j) = j\lambda_m$$

$$d \sin \theta_M(j) = j\lambda_M = j(\lambda_m + \Delta\lambda)$$

为了使光谱线不重叠，即第 j 级的长波 λ_M 的谱线与第 $j+1$ 级的短波 λ_m 的谱线不重叠，就要求 $\theta_M(j) < \theta_m(j+1)$ ，由上式可以得到

$$j(\lambda_m + \Delta\lambda) < (j+1)\lambda_m$$

$$\Delta\lambda < \lambda_m / j$$

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

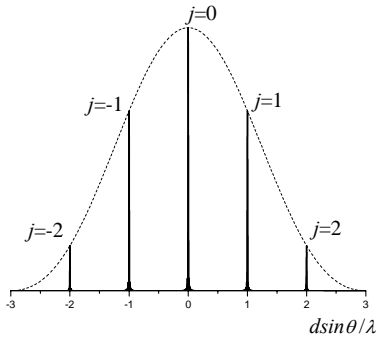
入射光的波长范围必须满足上式，才能保证第 j 级光谱不与第 $j+1$ 级光谱重合，这一光谱范围，称作自由光谱范围，即光栅可以自由工作的波长范围。

对于一级光谱 ($j=1$)，可以从光的短波端 λ_m 计算出光栅的自由光谱范围， $\lambda_M - \lambda_m = \Delta\lambda < \lambda_m$ ，所以一级光谱的自由光谱范围为 $(\lambda_m, 2\lambda_m)$ 。同样也可以从其长波端确定此范围，对于一级光谱有， $\Delta\lambda < \lambda_m = \lambda_M - \Delta\lambda$ ，即 $\Delta\lambda < \lambda_M / 2$ ，一级光谱的自由光谱范围为 $(\lambda_M / 2, \lambda_M)$ 。光栅方程要求 $\lambda_M < d$ ，当 $\lambda_M = d$ 时，自由光谱范围为 $(d/2, d)$ 。

5.3 闪耀光栅

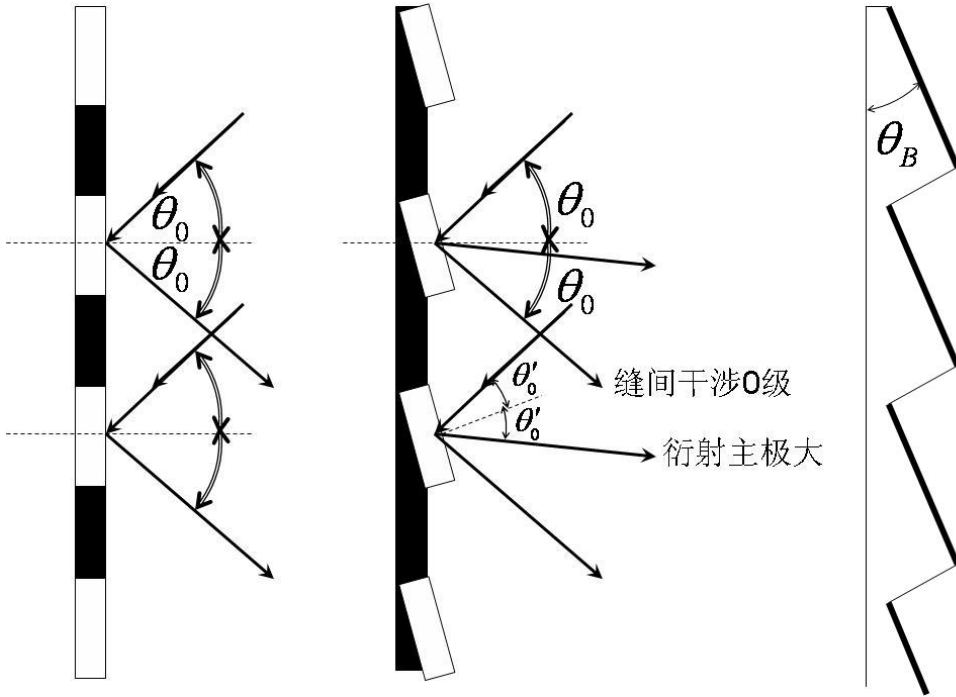
5.3.1 问题的提出与解决方案

前面所讨论的平面型光栅，无论是透射式的还是反射式的， $j=0$ 级的色散为零，但该衍射级的能量却是最大的。



必须注意到，能量集中是衍射的结果，即大部分能量都集中在几何像点上。

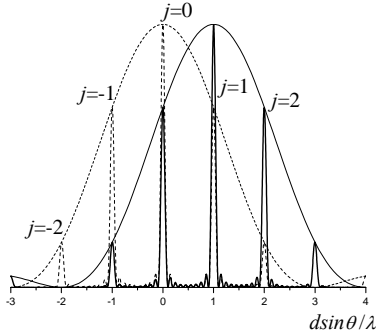
而色散是干涉的结果，来自不同狭缝的光具有不同的光程。对于平面型光栅，单元衍射零级的位置与缝间干涉的零级的位置恰好是重合的。如果让干涉零级与衍射的零级在空间上分开，则可以使衍射的绝大部分能量集中在一个有色散的衍射级上。即让光的几何像点偏离光栅平面的法线即可。



5.3.2 闪耀光栅

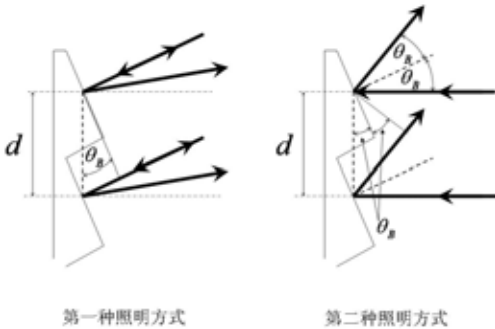
闪耀光栅具有这种能力。如果让光栅的反射面与光栅平面之间保持一定的夹角，则入射光相对于光栅平面法线的夹角为 θ_0 ，而相对于反射面（即衍射单元平面）法线的夹角为 θ'_0 ，则各个反射面的反射光进行干涉（即缝间干涉）的结果， $j = 0$ 级出现在与反射面法线夹角为 θ'_0 的方向；而对于每一个反射面，衍射的结果，其主极大、即中央 0 级衍射出现在与光栅平面法线夹角为 θ_0 的方向，即反射面的几何像方向。这两者是不重合的，因而，干涉的零级光谱不占据光强最大的位置，而是另外的 $j \neq 0$ 的谱线处于中央主极大处。如图所示。这种反射面与光栅平面不平行、而是保持一定夹角的光栅称作闪耀光栅。闪耀光栅同样也具有周期性结构，每一个反射面被称作闪耀面，闪耀面与光栅平面间的夹角称为闪耀角，

记作 θ_B 。



5.3.3 两种常用的照明方式

对于闪耀光栅，入射光通常采以特殊的角度入射，这种入射方式被称作闪耀光栅的照明方式。



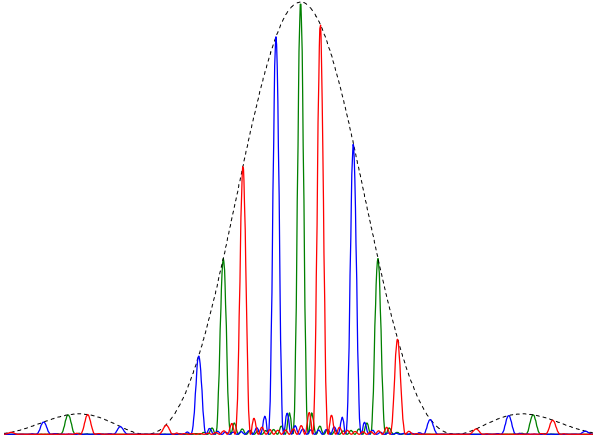
通常采用图示的两种方式入射（照明）。

第一种方式，光沿着闪耀面的法线入射，在反射光的方向上，缝间干涉的光程差为 $\delta = 2d \sin \theta_B$ ，在这一方向上的光谱线满足的条件是 $2d \sin \theta_B = j\lambda$ ， $j=1$ 时，衍射最强的波长为 $\lambda_{1B} = 2d \sin \theta_B$ ， λ_{1B} 称作一级闪耀波长。

其它波长的一级光谱出现在闪耀波长附近。由于衍射的零级有很大的宽度，所以，其它波长的一级谱线也有足够的强度。

第二种方式，光沿着光栅平面的法线入射，入射光与反射面（即闪耀面）简单夹角为 θ_B ，则反射光与入射光之间的夹角为 $2\theta_B$ ，因而，在反射光的方向上，相邻两个单元干涉的光程差为 $\delta = d \sin 2\theta_B$ ，因而有在反射方向上，有

$d \sin 2\theta_B = j\lambda$, 一级闪耀波长为 $\lambda_{1B} = d \sin 2\theta_B$ 。



具有一级闪耀波长的谱线会出现在衍射 0 级的方向，而波长为 $\lambda_{1B} + \delta\lambda$ 的谱线将出现在 $2d \sin(\theta_B + \delta\theta) = \lambda_{1B} + \delta\lambda$ 处（在采用第一种中明方式时），由于 $\delta\theta$ 并不是很大，所以该谱线依然有足够的强度。同理，如采用第一种中明方式，波长为 $\lambda_{1B} + \delta\lambda$ 的谱线将出现在 $d \sin(2\theta_B + 2\delta\theta) = \lambda_{1B} + \delta\lambda$ 处。

5.4 单色仪与光谱仪

衍射光栅具有色散能力，平行入射到光栅上的白光，经过光栅的色散，具有不同的波长的谱线将会出现在空间不同的位置上，即 $\theta = \theta(\lambda)$ 。如果保持整个系统不变，而只让某一个具有特定衍射角的谱线出射，则从系统中出射的光之具有单一的波长，这种仪器就是单色仪。如果转动光栅，从而使不同波长的谱线能够在某个方位一次出射，就是光谱仪。其实，单色仪与光谱仪是同一种仪器，只是根据使用目的不同而有不同的名称。现在的光栅光谱仪或单色仪中，几乎都采用闪耀光栅作为色散元件。

光栅光谱仪的结构可用图说明。入射狭缝 S_1 和出射狭缝 S_2 是位置是固定的，

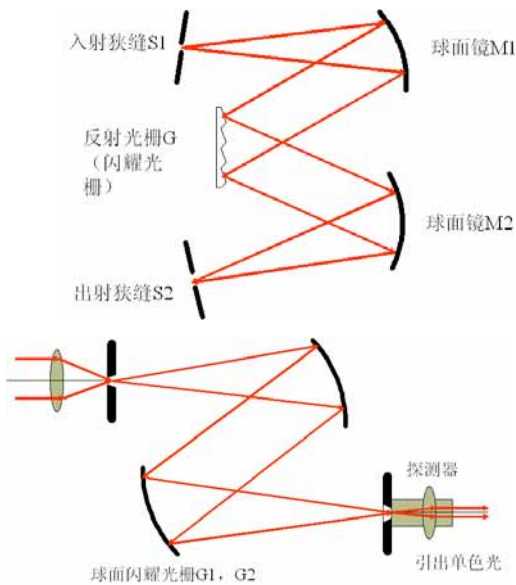
而缝宽可以调节。球面反射镜 M_1 的焦点就是入射狭缝，入射光经 M_1 变为平行光，射向光栅 G ，衍射光经过球面反射镜 M_2 汇聚后，射向出射狭缝 S_2 。转动光栅 G ，不同波长的谱线就可以从 S_2 射出。在 S_2 处，连接探测器，如光电倍增管等，即可以测得射入 S_1 的光谱。

如果将光栅 G 固定在某一角度保持不变，则从 S_2 出射的光，就具有固定的波长，就可以通过该装置从入射的白光中获得单一波长的出射光。

为了提高光谱仪的分辨本领，往往在其中安置两块衍射光栅，如图所示。经过第一块光栅 G_1 色散的光再入射到第二块光栅 G_2 上，进一步色散，则最后从狭缝 S_2 出射的光，单色性将进一步提高。双光栅单色仪的色分辨本领

$$A = A_1 A_2 = j_1 j_2 N_1 N_2$$

其中 A_1 、 N_1 、 j_1 和 A_2 、 N_2 、 j_2 分别是第一块光栅和第二块光栅的色分辨本领、光栅刻线数、各谱线级数。



双光栅光谱仪（单色仪）

5.5 正弦光栅

前面讨论的光栅称作黑白型光栅，即透光部分与遮光部分截然分开。与黑白型光栅不同，正弦光栅的具有可以用正弦或余弦函数表示的振幅透过率，其透过率往往表示为 $t \propto 1 + \cos \frac{2\pi}{d} x$ ，其中 d 为光栅的空间周期。则在衍射屏上，其瞳函数为

$$\tilde{U}_0(x) = \tilde{U}_0 \left[1 + \cos \frac{2\pi}{d} x \right],$$

单元衍射因子为

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\theta) &= K\tilde{U}_0 \frac{e^{ikr_0}}{f} \int_{-d/2}^{d/2} \left(1 + \cos \frac{2\pi}{d} x \right) e^{-ikx \sin \theta} dx \\ &= K\tilde{U}_0 \frac{e^{ikr_0}}{f} \int_{-d/2}^{d/2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{i\frac{2\pi}{d}x} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{d}x} \right) e^{-ikx \sin \theta} dx \\ &= K\tilde{U}_0 \frac{e^{ikr_0}}{f} \int_{-d/2}^{d/2} \left[e^{-ikx \sin \theta} + \frac{1}{2} e^{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} + \frac{1}{2} e^{i\left(-\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} \right] dx \\ &= K\tilde{U}_0 \frac{e^{ikr_0}}{f} \int_{-d/2}^{d/2} \left[e^{-ikx \sin \theta} + \frac{1}{2} e^{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} + \frac{1}{2} e^{i\left(-\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} \right] dx \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} &\int_{-d/2}^{d/2} \frac{1}{2} e^{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} dx \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)} \int_{-d/2}^{d/2} e^{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x} d\left[i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)x\right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)} \left[e^{i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)\frac{d}{2}} - e^{-i\left(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta\right)\frac{d}{2}} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{2i \sin[(\pi - k \frac{d}{2} \sin \theta)]}{i(\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta)}$$

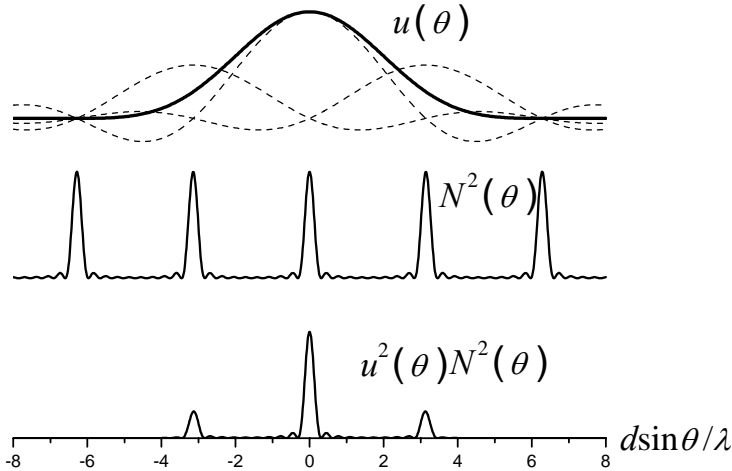
$$= \frac{d}{2} \frac{\sin[(\pi - k \frac{d}{2} \sin \theta)]}{\pi - k \frac{d}{2} \sin \theta} = \frac{d}{2} \frac{\sin(\pi - \beta)}{\pi - \beta}$$

$$\int_{-d/2}^{d/2} \frac{1}{2} e^{i(-\frac{2\pi}{d} - k \sin \theta)x} dx = \frac{d}{2} \frac{\sin(\beta + \pi)}{\beta + \pi}$$

于是

$$\tilde{u}(\theta) = K\tilde{U}_0 d \frac{e^{ikr_0}}{f} \left[\frac{\sin \beta}{\beta} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta - \pi)}{\beta - \pi} + \frac{1}{2} \frac{\sin(\beta + \pi)}{\beta + \pi} \right]$$

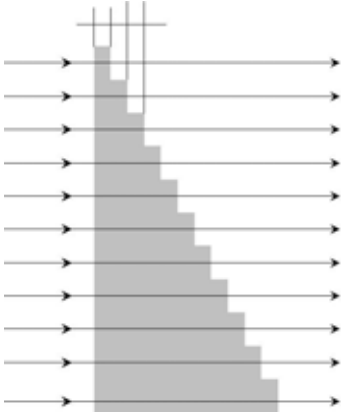
相当于具有三个不同的夫琅和费单缝衍射因子, 缝宽为 d , 狭缝中心分别在 $0, \pi, -\pi$ 处。正是多元衍射因子 $\tilde{N}(\theta)$ 的 0 级和 ± 1 级的位置。其余的级次全部抵消。所以只有这三级衍射。



5.6 位相光栅

振幅型衍射屏使得光的振幅发生变化, 上述各种黑白光栅和正弦光栅都属于

振幅型光栅；而相位型光栅则通过改变光的相位，使波前变化，从而重新构建光波场。具有周期性变化的相位因子的衍射屏就是相位光栅。



例如，将光学玻璃做成阶梯形结构，每一阶都有相等高度 d 和宽度 a ，设玻璃的折射率为 n ，则从玻璃相邻台阶射出的光，光程差为 $\delta = (n-1)a$ ，相位差为

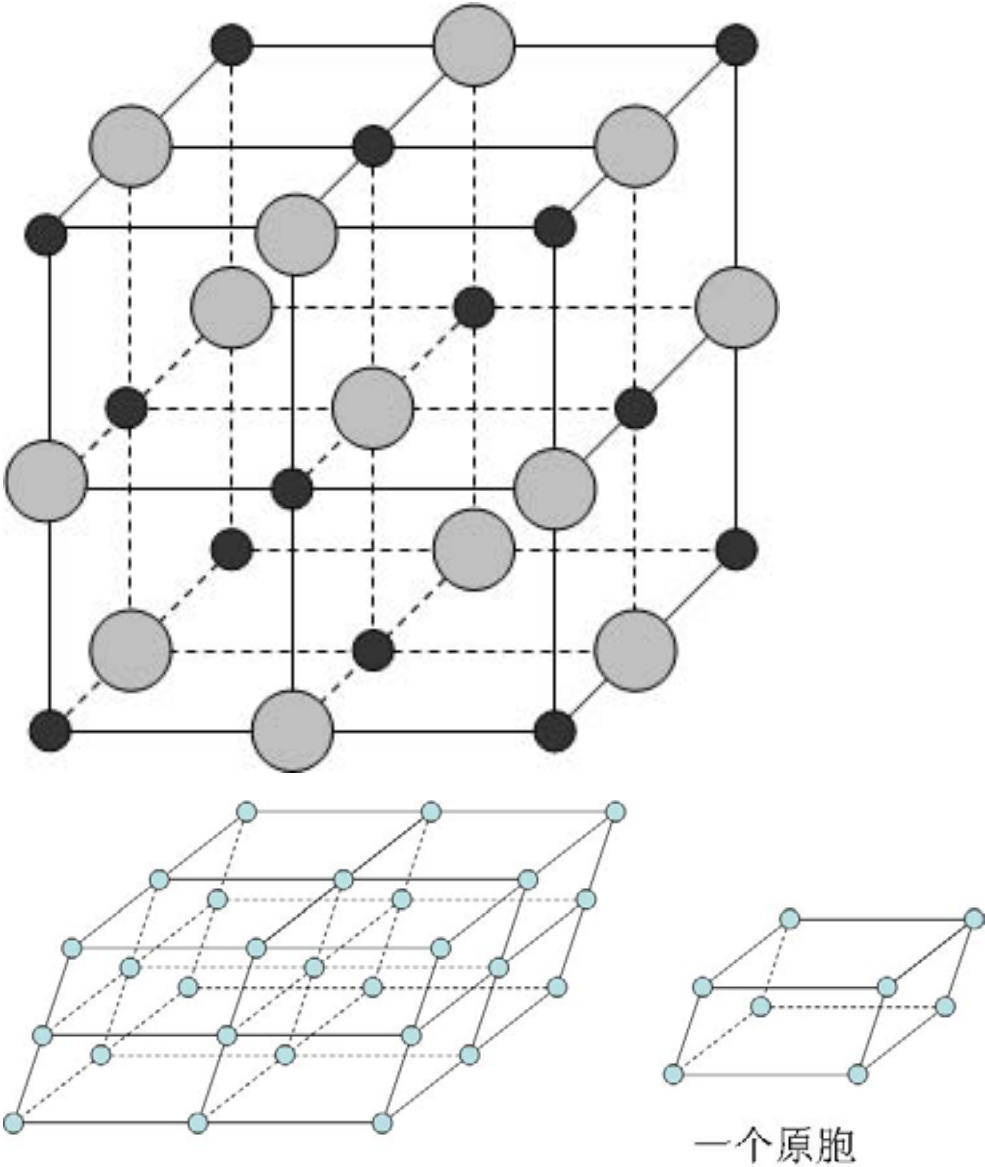
$$\Delta\varphi = k\delta = \frac{2\pi(n-1)a}{\lambda}。衍射的极大值条件为$$

5.7 X-RAY 在晶体中的衍射

5.7.1 晶格点阵

晶体具有周期性的空间结构，这是由于晶体中的原子、分子或离子在空间作周期性排列的结果。晶体的这种周期性可以用晶格描述。晶体的每一个结构单元，即结构基元，也就是仅包含一个原子、分子、或离子基团的最小的具有周期性的结构单元，称作晶体的原胞。将这些原胞在空间周期性排列，就组成了晶体。

在晶体结构学上，通常将一个原胞用一个点表示，则原胞的排列就变成了点的排列。由于每一个点代表一个原胞，所以这些点就构成了与晶体结构一致的三维空间网格，这种反映晶体结构的网格被称作晶格，或晶格点阵。



晶体的晶格或点阵

每一个格点都是由若干原子、分子、或离子基团组成，因而入射到格点的电磁波将会向各个方向散射，散射波遵循波的叠加原理进行叠加。散射的过程可能是相干的，也可能是非相干的。对于相干散射，散射波进行相干叠加，叠加的结果，使得沿某些方向散射的波得到大大的增强，而某些方向的散射波显著减弱。这种过程实际上就是衍射。因而具有空间周期性结构的晶体可以作为衍射光栅。这是一种三维的光栅。

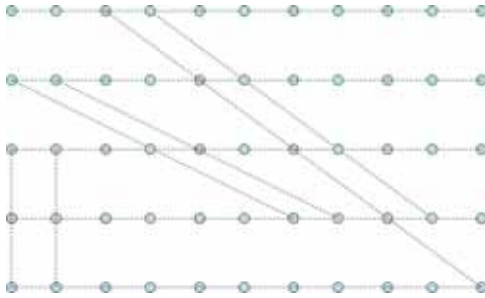
5.7.2 X-射线在晶体中的衍射

但是晶体的结构周期，即相邻格点的间距，晶格常数，通常比可见光的波长小得多，所以可见光不能在晶体中出现衍射。

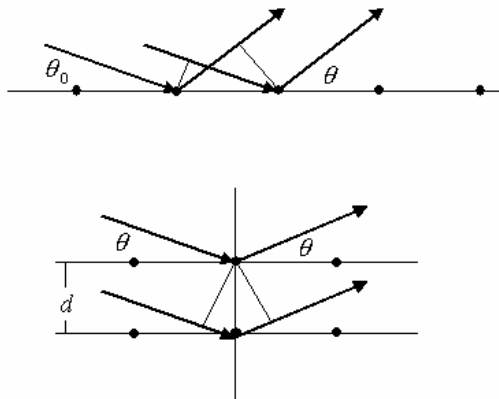
而 X 射线的波长与晶格常数匹配，X 射线可以被晶体衍射。

入射的 X 射线可以被其中的每一个格点散射。各个散射波进行相干叠加，产生衍射。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。

晶体中有很多的晶面族。不同的晶面族有不同的间距，即，晶格常数， d 。



一. 极大值条件



1. 晶面的衍射

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。

入射 X 光相对于晶面的夹角为 θ ，而散射光相对于晶面的夹角为 θ' ，如图所示。相对于晶面的入射角、散射角都是掠射角。

一个晶面上各个格点对入射光散射，相邻两个格点沿 θ 方向散射光的光程差为

$$\delta_1 = a(\cos \theta' - \cos \theta),$$

如果上述光程差满足 $\delta_1 = a(\cos \theta' - \cos \theta) = j\lambda$ ，则散射光相干叠加，将会

出现极大值。然而，晶格沿不同方向的散射光的强度并不相同，只有 $j = 0$ 的方向光强最大，其它方向的散射光，及时满足干涉相长的条件，强度也要弱得多。因而，每一个晶面的散射光，相干叠加的极大条件为 $\theta' = \theta$ 。这类似于衍射的情形。

2. 面间干涉

相邻晶面间的光程差为 $2d \sin \theta$ ，当该光程差等于波长整倍数时，相干叠加后，又极大值。因此面间干涉的极大值条件为。

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

该条件称作 Bragg 条件。

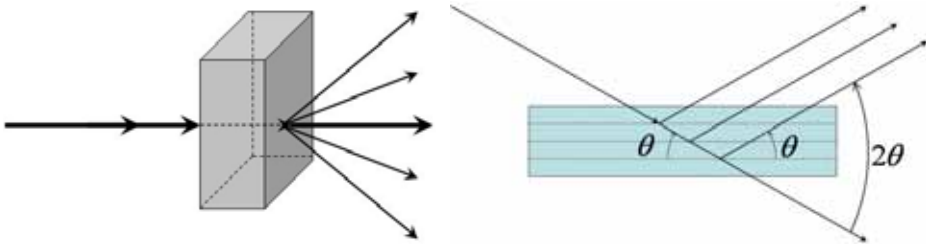
5.7.3 晶体 X-射线衍射的实验方法

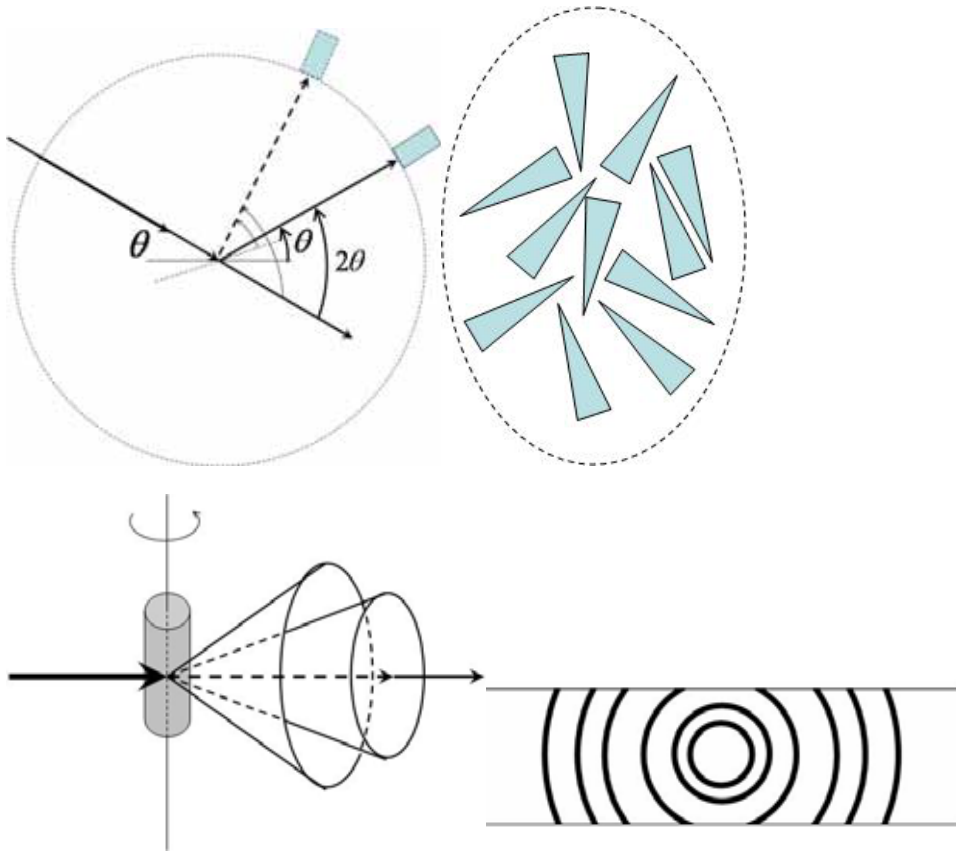
1. 劳厄 (Laue) 照相法

对于晶格常数未知的单晶体，可以采用具有连续谱的 X-射线衍射，用照像底板或其它探测器测量并记录衍射光的方位。

如图所示，对于晶体中的某一个晶面，如果发生衍射的掠入射角为 θ ，则相对于入射光的方向而言，衍射光偏转了 2θ 角；换言之，在不知晶面方向时，从衍射光相对于入射光的偏转角 2θ 可以确定衍射角为 θ ，进而确定晶面的取向。

所以，在测量单晶体的衍射时，入射光的方向是不变的，晶体放在可以转动的样品台上，探测器则处在一个圆周上。两者的转角保持联动，即样品转过 θ 角，探测器同时转过 2θ 角。这种 “ $\theta - 2\theta$ ” 扫描方式，可以测得各级衍射光，进而得到晶格常数 d 。





2. 德拜粉末法

在粉末样品中，多晶粒的晶面可以沿任意方向排列，即同一个晶面族，在不同的晶粒中可以有不同的取向，因而满足 Bragg 条件 $2d \sin \theta = j\lambda$ 的衍射光，只要相对于入射光转过 2θ 角即可，而与入射光成 2θ 角的直线构成了一个圆锥面，该圆锥的顶角为 4θ ，或者衍射光在照像底版上形成了以入射光为中心的一系列同心圆环。为了使得晶粒的取向更充分，可以让棒状的样品绕轴旋转，单色 X 光入射。由于样品中故衍射光沿圆锥面衍射。