

# V11B Symulacja dyfrakcji światła

I Pracownia Fizyczna, WFAIS UJ

---

## 1. Cel ćwiczenia

Badanie za pomocą symulacji dyfrakcji światła pochodzącego od i) szczeliny kołowej oraz ii) matrycy 4 x 4 takich szczelin kołowych, które modelują i) atom oraz ii) 2-wymiarowy kryształ o skończonych rozmiarach. Możemy prześledzić wpływ: rozmiaru szczeliny (czynnika atomowego), periodyczności matrycy (sieci przestrzennej i odwrotnej) oraz rozmiaru kryształu (funkcji kształtu kryształu) na postać wzoru dyfrakcyjnego. Dodatkowo do matrycy można wprowadzić nieporządek i symulować wzór dyfrakcyjny przejścia od kryształu do substancji amorficznej (np. topnienia). Układ użyty w symulacji przypomina układ do dyfrakcji cienkiej warstwy (używany np. w transmisyjnym mikroskopie elektronowym).

Na podstawie różnych cech wzorów dyfrakcji możemy wyznaczyć w różnych zadaniach do wyboru: i) odległość  $D$  obiektu matrycy szczelin (atomu) od ekranu dyfrakcyjnego, ii) stałą sieci  $d$  matrycy szczelin, iii) współczynnik określający kąt pierwszego minimum dla dyfrakcji na użytej szczelinie.

**UWAGI:** Zalecane wsparcie asystenta przy realizacji ćwiczenia. Z możliwych proponowanych do realizacji 5 zadań, zadania 2 i 5 przygotowują do zagadnień z kursu podstawy fizyki materii skondensowanej (kryształy, ciecze, ciekłe kryształy).

---

## 2. Użyteczne wiadomości

Podstawowe wiadomości są przedstawione w instrukcji do ćwiczenia [O18](#) (Badanie zjawiska dyfrakcji i interferencji światła laserowego). Poniżej użyto oznaczeń z instrukcji O18. Przedstawione zagadnienia dotyczą też ćwiczenia [019](#) (Badanie dyfrakcji światła laserowego na kryształach koloidalnym) z krytalografii. W tekście są odniesienia do równań wraz z ich numeracją z obu instrukcji O18 i O19.

Natężenie  $I(\underline{S})=|F(\underline{S})|^2$  światła rozproszonego w kierunku określonym przez wektor rozpraszania  $\underline{S}$  jest związane poprzez amplitudę fali rozproszonej  $F(\underline{S})$

$$F(\underline{S}) = \int \rho(\underline{r})e^{i\phi} dv = \int \rho(\underline{r})e^{i\underline{r}\underline{S}} dv := F[\rho(\underline{r})] \quad (1)$$

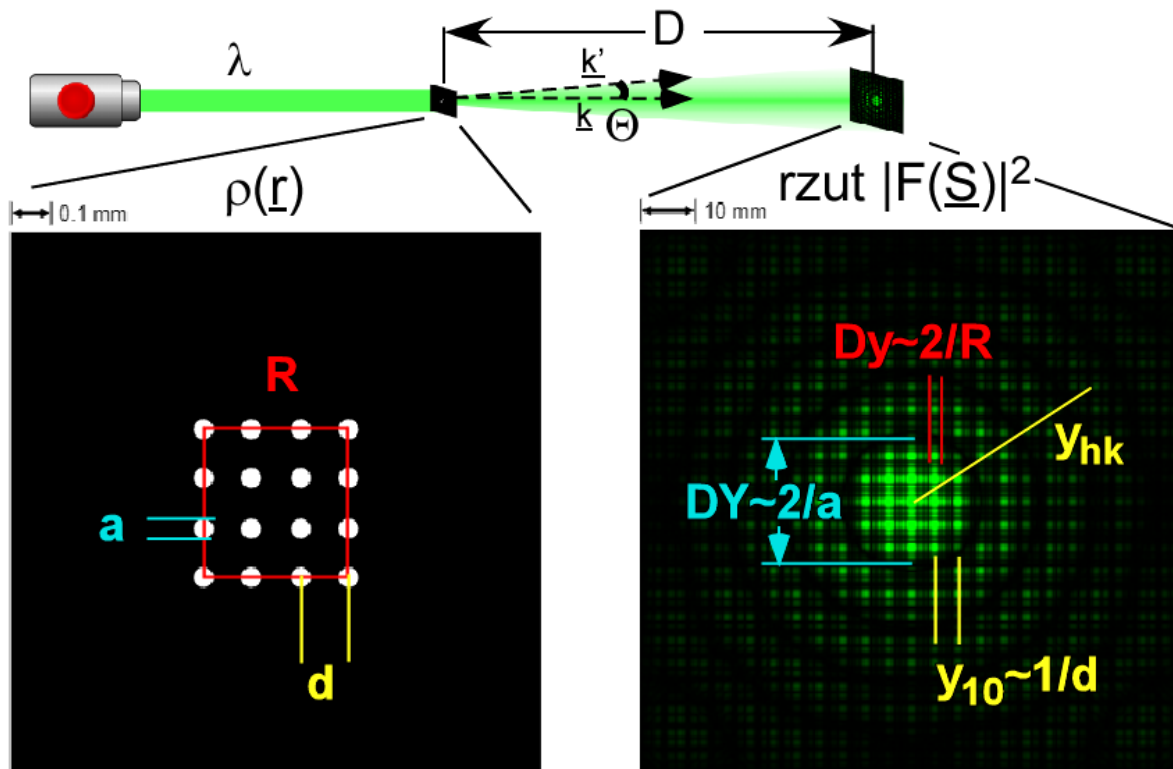
z transformatą Fouriera  $F[\rho(\underline{r})]$  funkcji  $\rho(\underline{r})$  gęstości rozpraszania obiektu. Różnica między wektorem falowym fali padającej i rozproszonej jest opisana przez kąt rozpraszania  $\Theta$  i wektor  $\underline{S}$  o długości  $|\underline{S}| = 2(2\pi/\lambda) \sin \Theta/2$  (**Rys. 1**).

Dla matrycy szczelin kołowych, jej funkcja  $\rho(\underline{r})$  gęstości rozpraszania (**Rys.1**) może być zapisana jako:

$$\rho(\underline{r}) = [\text{periodyczna matryca (sieć przestrzenna)} * \text{szczelina (atom)}] \bullet \text{kształt obiektu} \quad (2)$$

Funkcja gęstości rozpraszania szczeliny (atomu), opisana przez szerokość szczeliny  $a$ , jest ‘powielona’ w każdy węzeł periodycznej matrycy (sieci przestrzennej) o stałej  $d$  za pomocą splotu, tj. działania zaznaczonego przez ‘\*’. Węzły sieci są pojęciem matematycznym bez określonych rozmiarów, w które powyższy splot ‘lokuje’ szczeliny (atomy) o rozmiarach  $a$ . Opisywana przez splot periodyczna matryca szczelin o rozmiarach  $a$  (tzw. kryształ jednoatomowy) nie ma w rzeczywistości nieskończonej rozciągłości i dlatego musi być przemnożona (co zaznaczono symbolem ‘•’) przez funkcję kształtu

rzeczywistego obiektu o określonym rozmiarze  $R$ . Funkcja kształtu równa się jeden w obiekcie a zero poza tym obiektem.



**Rys. 1.** Obiekt rozpraszający światło  $\rho(\underline{r})$  w postaci matrycy szczelin kołowych o rozmiarze  $a$ , periodyczności  $d$  oraz rozciągłości  $R$ , oraz jego wzór dyfrakcyjny będący rzutem  $|F(\underline{S})|^2$ .

Amplituda  $F(\underline{S})$  fali rozproszonej na obiekcie o funkcji gęstości  $\rho(\underline{r})$  [równanie (2)] to jej transformata Fouriera. Korzystając z praw działania transformaty Fouriera na spłot i iloczyn funkcji możemy zapisać:

$$F(\underline{S}) = F[\rho(\underline{r})] = [\text{sieć dyfrakcyjna (odwrotna)} * \text{plamka (dyfrakcja na kształcie)}] \bullet$$

- dyfrakcja na szczelinie (czynnik atomowy) (3)

A więc wzór dyfrakcyjny badanego obiektu jest opisany przez (1) sieć o periodyczności  $\sim 1/d$ , określonej przez stałą  $d$  periodycznej matrycy. Węzły takiej sieci określają centra (2) plamek o niezerowych rozmiarach  $\sim 2/R$ , zależnych od rozciągłości  $R$  obiektu matrycy. Tutaj  $R = Nd$  dla  $N = 4$  szczelin. Dodatkowo, tak zdefiniowana postać funkcyjna jest mnożona przez (3) izotropową funkcję, której domena centralna o rozmiarze  $\sim 2/a$  oraz oscylacje zależą od odwrotności szerokości  $a$  kołowych szczelin tworzących matrycę. W przypadku 1-wymiarowej linii  $N$  szczelin równanie (3) sprowadza się do równania (4.12.20). W ćwiczeniu proponujemy zbadanie tych 3 składników (1-3) wzoru dyfrakcyjnego.

### 3. Układ doświadczalny i możliwy przebieg eksperymentu

Do wykonania ćwiczenia użyj aplikacji z PhET Interactive Simulations (<https://phet.colorado.edu/>). Użyj symulacji [https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-interference/latest/wave-interference\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-interference/latest/wave-interference_en.html), w panelu Diffraction, zgodnej z Rys.1.

Uzyskane na monitorze obrazy dyfrakcyjne ‘złap’ i zapisz, np. za pomocą programu Narzędzie Wycinanie. Następnie otwórz je za pomocą darmowego programu ImageJ (<https://imagej.nih.gov/ij/>). Po jego pobraniu rozpakuj go w dowolnym miejscu i uruchom plik ImageJ.exe. Umieść wszystkie obrazy w wybranym folderze. Otwórz wybrany obraz interferencyjny korzystając z menu File ▶ Open... Następnie wybierz z narzędzi prostą (4-ta ikonka od lewej w menu) i zaznacz linię na ekranie odpowiadającą skali (10 mm). Potem wybierz Analize ▶ Set Scale i wpisz jako known distance 10 mm (nie zapomnij o jednostkach). W ten sposób wprowadzisz miarę położenia na ekranie w znanych jednostkach. Teraz możesz już mierzyć odległości  $y_{hk}$  na obrazie dyfrakcyjnym. Dokładniejsze pomiary odległości uzyskasz korzystając z profil wzoru dyfrakcyjnego czyli zależności natężenia światła na ekranie od pozycji  $y_{hk}$ . Aby uzyskać profil z obrazu wybierz Analize ▶ Plot Profile. Aby zapisać dane do pliku csv wybierz na tym wykresie na dole Data ▶ Save Data... i zapisz plik. Uzyskane wyniki możesz analizować za pomocą programu Origin.

### 3.1. Składnik periodyczny wzoru dyfrakcyjnego – czynnik sieciowy

Sieć opisująca we wzorze dyfrakcyjnym pozycje centrów maksimum (hk) względem plamki centralnej (00) to projekcja *sieci odwrotnej*  $L^*(hk) = h \underline{a}^*_1 + k \underline{a}^*_2$ . Jej wektory bazowe są określone jednoznacznie przez wektory sieci przestrzennej. Dla sieci kwadratowej mają one długość  $|\underline{a}^*_1| = |\underline{a}^*_2| \sim 1/d$  odwrotnie proporcjonalną do stałej  $d$  periodycznej matrycy. Wskaźniki (hk) to wskaźniki Millera określające rodziny linii (1-wymiarowych ‘płaszczyzn’) sieciowych prostopadłych do  $L^*(hk)$  a odległości między tymi liniami wchodzą do prawa Bragga.

Odległość  $y_{hk}$  we wzorze dyfrakcyjnym maksimum (hk) od środka maksimum zerowego (00) ma postać:

$$y_{hk} = \frac{\lambda D}{d} \sqrt{h^2 + k^2} \quad (4)$$

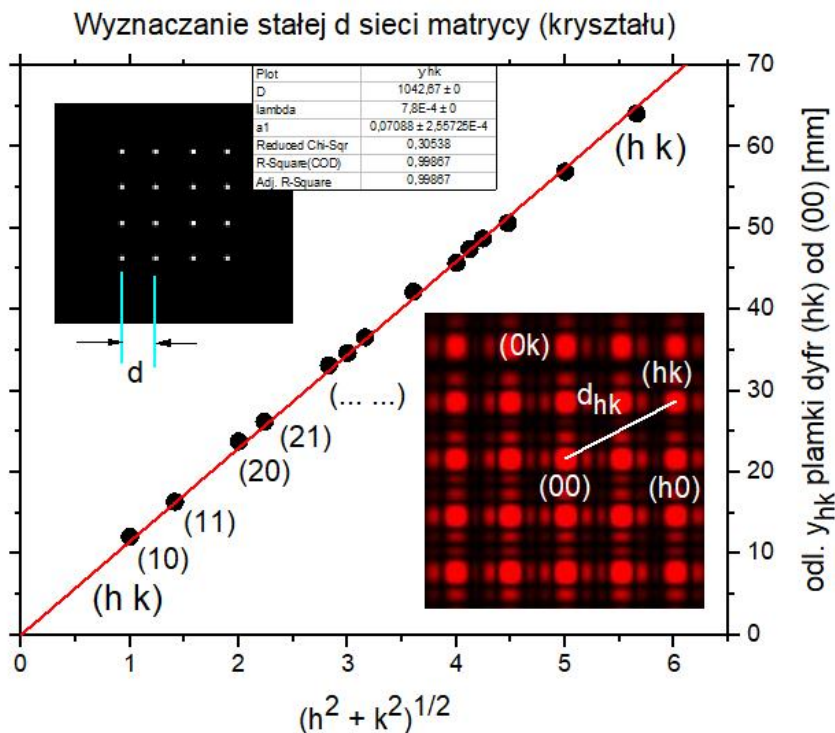
którą [można wyprowadzić z równań (4.15.3), (4.15.4) i (4.15.5) a] w przypadku sieci 1-wymiarowej pokrywa się z równaniem (4.12.4). Parametr D określa odległość ekranu od matrycy szczelin (**Rys.1**).

W układzie doświadczalnym aplikacji z PhET wybierz matrycę 4 x 4 źródeł światła przez kliknięcie w 4-tą od góry ikonkę pod panelem z długością fali. Aby te szczeliny dobrze przybliżały **punktowe źródła światła** wybierz najmniejszą możliwą średnicę szczeliny (circle diameter) równą 0.01 mm. Dodatkowo by to była matryca z  $N = 4$  (dyskusja po równaniu 4.12.11 w instrukcji O18) wybierz brak nieporządku (Disorder: None). Wybierz długość światła  $\lambda$  i ją zanotuj.

Skończona liczba N szczelin w matrycy powoduje powstanie N-2 maksimum bocznych między maksimumami (hk). Przy rosnącej liczbie N drastycznie spada względne natężenie światła bocznych maksimumów w porównaniu do natężenia maksimumów głównych (hk) (porównaj np. przypadek  $N = 6$  i  $N = 8$  na rys. 4.12.5). A więc w badaniach krystalograficznych maksima boczne nie są istotne.

**ZAD.1.** Dla powyższego układu możesz wyznaczyć i wykreślić relację między wyznaczaną stałą  $y_{10}$  periodycznego wzoru dyfrakcyjnego a stałą  $d$  sieci matrycy (zadawaną jako wielokrotnie zmieniany parametr Lattice Spacing). Mierzac wielokrotności  $y_{10}$  we wzorze dyfrakcyjnym możesz wyznaczyć  $y_{10}$  dokładniej. Następnie używając wyznaczonej relacji  $y_{10}(d)$  możesz przy pomocy równania (4) określić odległość  $D$  ekranu od matrycy szczelin.

**ZAD.2.** Dla znanej odległości D możesz też wyznaczyć stałą sieci  $d$  na podstawie analizy pojedynczego wzoru dyfrakcyjnego, tak to się robi w krystalografii. W tym celu zmierz odległości maksimumów (hk) od plamki centralnej na wzorze dyfrakcyjnym i wykreśl je (**Rys. 2**) w zależności od  $(h^2 + k^2)^{0.5}$ , a następnie skorzystaj z równania (4) aby dopasować wartość  $d$ .



**Rys. 2.** Wyznaczanie stałej d sieci matrycy na podstawie pomiarów odległości maksimum (hk) od plamki centralnej na wzorze dyfrakcyjnym.

### 3.2. Składnik określający wielkość plamek dyfrakcyjnych – czynnik kształtu

Każdy węzeł sieci opisującej wzór dyfrakcyjny (patrz równanie (3) i **Rys.1**) jest ‘ubrany’ przez funkcję splotu (\*’) w plamki o skończonych rozmiarach określonych przez rozciągłość obiektu. Dla układu N szczelin odległych między sobą o d, czyli o rozciągłości  $R = Nd$ , rozmiar obszaru wzoru dyfrakcyjnego o niezerowym natężeniu światła jest zdefiniowana przez warunek zerowego natężenia interferencyjnego (4.12.14) minimum bocznego  $N\pi d/\lambda \sin \Theta = \pi R/\lambda \sin \Theta = n \pi$ . Stąd odległość między miejscami zerowego natężenia 2 minimów bocznych ( $n = -1$  i  $1$ ) najbliższych danemu maksimum (hk) definiuje wielkość  $D_y$  plamki dyfrakcyjnej:

$$D_y = 2 \frac{\lambda D}{R} \quad (5)$$

Czynnik kształtu powoduje, że dla małych kryształów plamki dyfrakcyjne są duże. W przypadku próbek anizotropowych, np. cienkich warstw używanych w transmisyjnej mikroskopii elektronowej, powoduje on powstanie anizotropowych plamek dyfrakcyjnych wydłużonych w kierunku małego wymiaru próbki.

**ZAD.3.** Dla powyższego układu możesz określić i wykreślić relację między wyznaczaną ze wzoru dyfrakcyjnego wielkością plamki  $D_y$  a rozmiarem  $R$  obiektu matrycy zadany jako  $Nd = 4d$  przez stałą d sieci matrycy (wielokrotnie zmieniany parametr Lattice Spacing). Aby zmierzyć  $D_y$  dokładniej skorzystaj z profili natężenia. Dodatkowo możesz mierzyć wielokrotności  $D_y$  we wzorze dyfrakcyjnym. Następnie przy pomocy równania (5) możesz wyznaczyć z zależności  $D_y(R)$  odległość  $D$  ekranu od matrycy szczelin.

### 3.3. Izotropowy (i oscylacyjny) składnik wzoru dyfrakcyjnego – czynnik szczeliny (atomowy)

Omówione powyżej (sekcji 3.1 i 3.2) 2 składniki wzoru dyfrakcyjnego były zademonstrowane dla punktowych źródeł światła przy wybranej najmniejszej możliwej średnicy szczeliny (circle diameter) równej 0.01 mm. Dlatego ukryty był 3ci składnik wprowadzony przez dyfrakcję światła na pojedynczej szczelinie (pojedynczym atomie). Przeprowadź symulację dyfrakcji na matrycy szczelin z większą wartością średnicy szczeliny. Zauważysz, że składniki sieciowy i kształtu wzoru dyfrakcyjnego są przemnażane przez izotropową (a nawet oscylującą) funkcję dyfrakcji światła na szczelinie, odpowiadająca tzw. czynnikowi atomowemu w krystalografii (patrz **Rys.1** i równanie (3)). Dlatego jest

ona dodatkowym warunkiem na natężenie wzoru dyfrakcyjnego w każdym jego miejscu. Innymi słowy, funkcja dyfrakcji na pojedynczej szczelinie (pojedynczym atomie) obrysowuje natężenia światła określone przez czynnik sieciowy i czynnik kształtu.

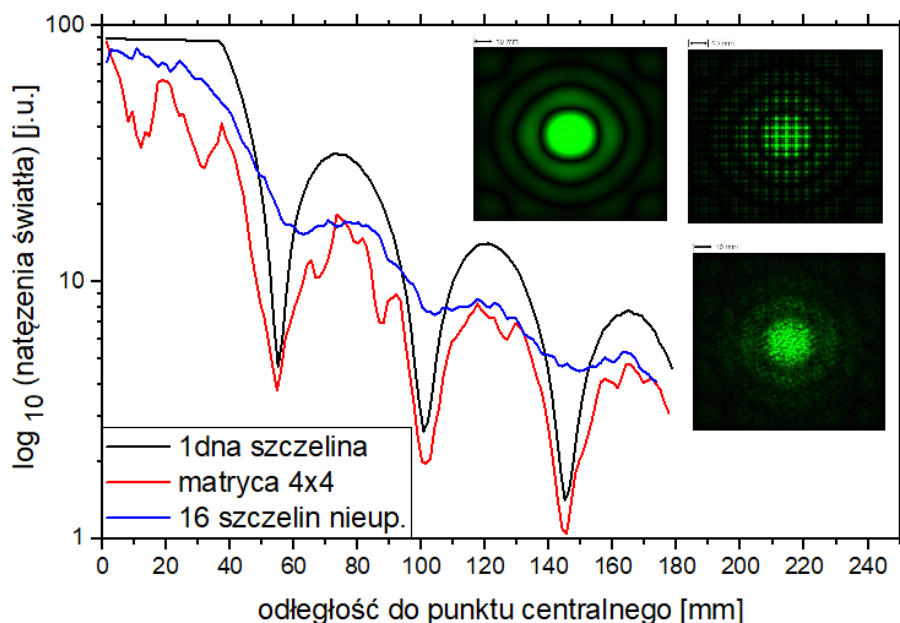
Rozmiar obszaru wzoru dyfrakcyjnego pojedynczej szczeliny o niezerowym natężeniu światła jest zdefiniowany przez warunek zerowego natężenia interferencyjnego (4.12.15) na minimum:  $a \sin \Theta = m \lambda$ . Stąd odległość między miejscami zerowego natężenia 2 minimów ( $m = -1$  i  $1$ ) najbliższych maksimum centralnemu dyfrakcji Fraunhofera definiuje rozciągłość **DY** domeny centralnej wzoru dyfrakcyjnego:

$$DY = 2 \frac{\lambda D}{a} \quad (6)$$

Należy dodać, że kolejne położenia (licząc od punktu centralnego dyfrakcji) wartości zerowych dla izotropowych oscylacji natężenia światła odpowiadają wielokrotnościom **DY/2**.

**ZAD.4.** Przeprowadź symulację dyfrakcji dla stałej długości fali  $\lambda$  na matrycy szczelin o stałej wartości stałej **d** matrycy ale dla różnych wartości szerokości szczeliny **a** (wielokrotnie zmieniany parametr Circle Diameter). Dla każdego przypadku zmierz rozciągłość **DY** domeny centralnej wzoru dyfrakcyjnego. Aby wyznaczyć **DY** dokładniej możesz zmierzyć wielokrotności **DY**. Następnie z zależności **DY(a)** możesz sprawdzić, dla wyznaczonej wcześniej odległości **D** ekranu od matrycy szczelin, współczynnik proporcjonalności równania (6). W przypadku dyfrakcji Fraunhofera dla szczeliny kołowej, Airy podał ten współczynnik jako równy nie 1.0 ale 1.22.

**ZAD.5.** Porównaj dla zadanych parametrów symulacji: długości fali  $\lambda$  i szerokości szczeliny **a** 3 przypadki dyfrakcji (**Rys. 3**): i) na pojedynczej szczelinie, ii) na matrycy szczelin o określonej stałej **d**, iii) na tej samej matrycy z wprowadzonym nieporządkiem translacyjnym oraz odejściem od kołowej symetrii szczelin (Disorder: Lots). W tym celu najlepiej wprowadź do funkcji ImageJ wtyczkę Radial Profile (<https://imagej.nih.gov/ij/plugins/radial-profile.html>) pozwalającą na wykreślanie profili wzdłuż promienia który jest uśredniony radialnie (Plugins > Radial Profile). Przedyskutuj otrzymane wyniki. Wykres natężenia możesz przedstawić w zależności do wartości wektora rozpraszania **|S|**. Możesz też zaznaczyć wskaźnikami (hk) pochodzenie dodatkowych maksimum pochodzących od periodyczności matrycy.



**Rys. 3.** Radialnie uśredniony profil dyfrakcji na szczelinie, na matrycy 4 x 4 szczelin, na matrycy po niecałkowitym rozporządkowaniu.