

## X 射线平晶谱仪色散曲线和波长的确定

范品忠 张正泉

(中国科学院上海光机所, 201800)

**提要:** 本文给出了 X 射线平晶谱仪色散曲线几种解析表达式, 它们形式不同, 但完全等价。提出了几种独立测定激光等离子体 X 射线波长的方法, 这些方法无需任何参考谱线或谱仪参数。

**关键词:** X 射线光谱学, 激光等离子体, 晶体谱仪

### Dispersion curve and wavelength determination in flat-crystal X-ray spectrograph

*Fan Pinzhong, Zhang Zhengquan*

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai)

**Abstract:** Four analytical expressions, different in form but equivalent to each other, of flat-crystal X-ray spectrograph are presented. Several methods of wavelength determination without reference wavelengths are proposed.

**Key words:** X-ray spectroscopy, laser-produced plasma, flat-crystal X-ray spectrograph

### 一、引 言

激光等离子体的线度很小, 其直径一般为几十微米, 可看作点光源。平晶谱仪被广泛地用来获得这种点状高温等离子体发射的 X 射线谱, 在激光核聚变、X 射线激光和高价离子 X 射线光谱学研究中起着十分重要的作用<sup>[1~3]</sup>。波长的精确测定有助于谱线的正确辨认和归类。在实验上波长一般由谱仪的色散曲线, 严格地说由谱片的色散曲线, 即波长值或其有关量与谱线在谱片上的位置之间的函数关系来确定。在不同的实验中光源相对谱仪的位置会有所变化, 因此同一谱仪获得的不同谱片的色散曲线, 即使属于同一批实验, 也不可能是完全相同的。所以最理想的是对每张谱片都应作出相应的色散曲线。

从实验上确定谱片的色散曲线要求在光谱中含有几条能明确辨认的、波长精确已知的谱线作为参考, 叫做参考谱线。为此往往在待测光源中有意掺入一些杂质, 这些杂质能发射参考谱线。一般多为低  $Z$  物质如 Al、Mg 和 Si 等, 它们的类氢和类氦谱线结构简单易辨, 波长都作过精确测定, 很适合作参考谱线。另一方面, 对一定的晶体谱仪谱片, 可由谱仪结构参数和光源与谱仪的相对位置推得色散曲线。但光源中掺入杂质会影响光源的辐射性质; 而且当杂质

元素与光源中原有元素的电离电位相差很多时, 它们的发光空间位置是不同的。另外光源与谱仪的相对位置很难精确测定。在这些情况下就不能用上述方法来推得谱片的色散曲线了。本文从平晶谱仪色散曲线几种解析表达式出发介绍几种在不知谱仪参数和没有参考波长的情况下确定谱片色散曲线和波长的方法。

## 二、平晶谱仪谱片色散曲线解析表达式

平晶谱仪的光路及光源与它的相对位置示于图 1。其中  $S$  表示光源,  $S'$  为其在晶体中的虚像点;  $C, C'$  为晶体平面,  $f, f'$  为底片平面,  $\alpha$  为这两个平面间的夹角,  $O$  为  $S$  至晶体平面的垂足,  $SO = S'O = h$ ;  $F$  为像点  $S'$  至底片平面的垂足,  $S'F = f$ 。在底片平面内任取坐标原点

$$O_y, O_y F = a;$$

在晶体平面内任取坐标原点  $O_x, O_x C = b$ 。除晶体晶面间距参数  $2d$  外, 晶体平面和底片平面间的夹角  $\alpha$ 、源点  $S$  至晶体平面距离  $h$  和像点  $S'$  至底片平面距离  $f$  是最重要的谱仪谱片参数。 $\alpha$  角描述晶体谱仪本身的几何结构关系, 是表征谱仪

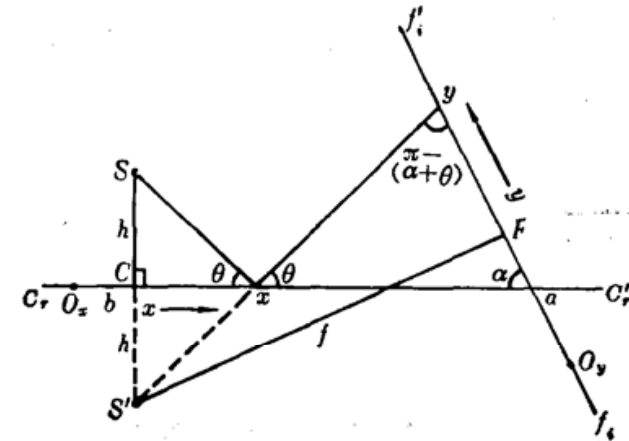


图 1 平晶谱仪光路图

本身的一个常数。 $h$  和  $f$  描述光源与谱仪间的相对位置。另外参数  $a$  和  $b$  是确定  $y$  和  $x$  坐标原点的常数。一旦  $\alpha, h, f, a$  和  $b$  确定了, 相应的光谱也就定了, 即这组参数完全描述所摄光谱的几何性质。

设 X 射线以布喇格角  $\theta$  射到晶体平面上, 其入射点的坐标为  $x$ , 经衍射后以  $\pi - (\alpha + \theta)$  角射到底片上, 底片表面入射点的坐标为  $y$ 。由图 1 的几何关系可得平晶谱仪的两个基本方程<sup>[4]</sup>:

$$y - a = -f \cot(\alpha + \theta) \quad (1)$$

$$\cot \theta = \frac{x - b}{h} \quad (2)$$

由(1)式和(2)式经简单运算后可得

$$y = A + \frac{B}{x + C} \quad (3)$$

其中

$$A = a - f \cot \alpha \quad (4)$$

$$B = hf(1 + \cot^2 \alpha) \quad (5)$$

$$C = h \cot \alpha - b \quad (6)$$

由(3)式可知由点源  $S$  发出的 X 射线在底片表面和晶体表面入射点坐标  $y$  和  $x$  为双曲线关系, 其形状由常数  $A, B$  和  $C$  决定。常数  $A, B$  和  $C$  可由双曲线上任意三个点的坐标如  $(x_1, y_1)$ 、 $(x_2, y_2)$  和  $(x_3, y_3)$  定出来:

$$C = \frac{\Delta x_{31}}{K} - x_1 \quad (7)$$

$$B = \frac{\Delta y_{21}}{\Delta x_{12}} \cdot \frac{\Delta x_{31}}{K} \left[ \Delta x_{21} + \frac{\Delta x_{31}}{K} \right] \quad (8)$$

$$A = y_1 - \frac{\Delta y_{21}}{\Delta x_{12}} \left[ \Delta x_{21} + \frac{\Delta x_{31}}{K} \right] \quad (9)$$

其中

$$\Delta x_{ij} = x_i - x_j$$

$$\Delta y_{ij} = y_i - y_j$$

$$K = \frac{\Delta y_{21}}{\Delta y_{32}} \cdot \frac{\Delta x_{23}}{\Delta x_{12}} - 1 \quad (10)$$

由此可以看出  $B$  只与  $x$  和  $y$  的差值有关, 与  $a$  和  $b$ , 即坐标原点  $O_x$  和  $O_y$  的选取无关, 然而  $A$  与  $y$  坐标原点(即  $a$ )的选取有关,  $C$  与  $x$  坐标原点(即  $b$ )的选取有关。

从(1)式出发我们还可以得到另一表达式:

$$y = A_0 + \frac{B_0}{\cot \theta + \cot \alpha} \quad (11)$$

其中,

$$A_0 = A = a - f \cot \alpha \quad (12)$$

$$B_0 = B/h = f(1 + \cot^2 \alpha) \quad (13)$$

由(11)式可知  $y$  与  $\cot \theta$  的关系也是双曲线关系, 其形状由常数  $A_0$ 、 $B_0$  和  $\cot \alpha$  决定。常数  $A_0$ 、 $B_0$  和  $\cot \alpha$  也可由色散曲线上三个点的坐标  $(\cot \theta_1, y_1)$ ,  $(\cot \theta_2, y_2)$  和  $(\cot \theta_3, y_3)$  定出来:

$$\cot \alpha = \frac{\cot \theta_3 - \cot \theta_1}{K_0} - \cot \theta_1 \quad (14)$$

$$B_0 = \frac{\Delta y_{21}}{\cot \theta_1 - \cot \theta_2} \cdot \frac{\cot \theta_3 - \cot \theta_1}{K_0} \left( \cot \theta_2 - \cot \theta_1 + \frac{\cot \theta_3 - \cot \theta_1}{K_0} \right) \quad (15)$$

$$A_0 = y_1 - \frac{\Delta y_{21}}{\cot \theta_1 - \cot \theta_2} \left( \cot \theta_2 - \cot \theta_1 + \frac{\cot \theta_3 - \cot \theta_1}{K_0} \right) \quad (16)$$

其中,

$$K_0 = \frac{\Delta y_{21}}{\Delta y_{32}} \cdot \frac{\cot \theta_2 - \cot \theta_3}{\cot \theta_1 - \cot \theta_2} - 1 \quad (17)$$

此外, 通过  $\cot \theta = 1/\tan \theta$ , 还可以得到另一等价表达式<sup>[5]</sup>:

$$y = A_t + \frac{B_t}{\tan \theta + \tan \alpha} \quad (18)$$

其中,

$$A_t = a + f \tan \alpha \quad (19)$$

$$B_t = -f(1 + \tan^2 \alpha) \quad (20)$$

这样关于平晶谱仪色散曲线共有四种不同形式的解析表达式, 即(1)、(3)、(11)和(18)式。它们虽然形式各异但却描述同一色散曲线, 因此是完全等价的。

### 三、色散曲线的确定

如上所述, 平晶谱仪的色散曲线是关于变量  $x$ 、 $\cot \theta$  或  $\tan \theta$  的二次曲线, 它的几个不同形

式的表达式中都包含有三个常数。这三个常数可用曲线上三个已知点的坐标确定, 因此关键的问题是要在实验上定出三个点的坐标。一般在实验上用三条参考谱线来给出三个点的坐标。如果在某一光谱中参考谱线很多, 可用曲线拟合的方法来求得最佳描述该曲线的三个常数。在拟合过程中多采用多项式拟合方法, 有的用三次多项式, 有的用二次多项式。知道了平晶谱仪谱片色散曲线的精确解析表达式是双曲线型的两次曲线, 用上述几种形式的解析表达式来进行拟合似乎更合理, 精度也更高<sup>[4,5]</sup>。

在实验中往往会遇到在待分析的光谱中没有任何波长已知的谱线。在这种情况下非常需要一种独立确定波长的方法: 即在既不知道任何参考谱线, 也不知道光源与谱仪相对位置或谱仪参数的情况下, 从实验上确定待测谱线精确波长的方法。下面我们从(3)和(11)式出发提出几种独立确定波长的可能方法。

$$1. y = A + \frac{B}{x+C}$$

用晶体谱仪拍摄激光等离子体 X 射线谱的实践中发现: 在所拍摄的光谱中或多或少存在连续谱, 而晶体表面的缺损和划痕也会明显地投映在所拍得的光谱中。如果我们有意在晶体表面加上一个有三条平行线的特制光阑或直接在晶体表面镀上三条平行线, 这些平行线垂直于晶体的色散方向并由高 Z 物质构成。由于有平行线条的地方不发生衍射, 由点源发出的 X 射线将在底片上产生这些平行线条的阴影像。这样晶体表面平行线的位置和底片上相应的阴影像的位置一起提供了三组  $(x, y)$  坐标值, 从实验上求得三个常数  $A$ 、 $B$  和  $C$ 。

但是(4)、(5)和(6)式的左边是描述色散曲线的三个常数  $A$ 、 $B$  和  $C$ , 而右边是 5 个描述谱片的参数  $\alpha$ 、 $h$ 、 $f$ 、 $a$  和  $b$ 。要解出这 5 个参数尚缺两个独立方程。如果把底片平移  $\Delta f$ , 可获得另外两个方程:

$$A_1 = a_1 - (f + \Delta f) \cot \alpha \quad (21)$$

$$B_1 = h(f + \Delta f)(1 + \cot^2 \alpha) \quad (22)$$

但同时又增加了一个未知参数  $a_1$ 。如果  $\alpha$  角已知, 则可从(4)、(5)、(6)、(21)和(22)式求得  $h$ 、 $f$ 、 $a$ 、 $a_1$  和  $b$  等 5 个参数。如果再将底片平面相对晶体平面转动一个角度  $\Delta \alpha$ , 则又可获得三个方程:

$$A_2 = a_2 - f_2 \cot(\alpha + \Delta \alpha) \quad (23)$$

$$B_2 = hf_2[1 + \cot^2(\alpha + \Delta \alpha)] \quad (24)$$

$$C_2 = h \cot(\alpha + \Delta \alpha) - b \quad (25)$$

同时又增加两个未知参数  $a_2$  和  $f_2$ 。这样 8 个未知参数  $\alpha$ 、 $h$ 、 $f$ 、 $f_2$ 、 $a$ 、 $a_1$ 、 $a_2$  和  $b$  可从(4)、(5)、(6)、(21)、(22)、(23)、(24)和(25)等 8 个方程唯一地确定。因此在既不知道谱仪几何参数和源与谱仪相对位置, 也没有任何参考波长的情况下采用先平移后转动(或先转动后平移)的方法就能确定谱线的绝对波长值。

$$2. y = A_c + \frac{B_c}{\cot \theta + \cot \alpha}$$

(12)和(13)式共有 3 个未知数, 即  $\alpha$ 、 $f$  和  $a$ , 如果  $\alpha$  已知, 可以求得  $f$  和  $a$ 。如将底片作一平移, 可得另外两个方程:

$$A_{c1} = a_1 - (f + \Delta f) \cot \alpha \quad (26)$$

$$B_{c1} = (f + \Delta f)(1 + \cot^2 \alpha) \quad (27)$$

增加的未知数  $a_1$  连同原来的三个未知数正好由(12)、(13)、(26)和(27)式确定。这样只要两张谱片就够了。

### 3. 晶体平移

如果将晶体沿色散方向一切两半, 并且使切得的半条晶体相对另半条晶体(即原来晶体的位置)位移  $\Delta h$ , 见图 2。假设在光谱中包含两条波长未知的谱线  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$ , 它们在同一谱片上获得的两条相互平行的光谱中的坐标分别为  $y_1$ 、 $y_2$ 、 $y'_1$  和  $y'_2$ , 则

$$y_1 = a + f \cot \alpha + \frac{f(1 + \cot^2 \alpha)}{\cot \theta_1 + \cot \alpha} \quad (28)$$

$$y_2 = a + f \cot \alpha + \frac{f(1 + \cot^2 \alpha)}{\cot \theta_2 + \cot \alpha} \quad (29)$$

$$y'_1 = a' + f' \cot \alpha + \frac{f'(1 + \cot^2 \alpha)}{\cot \theta_1 + \cot \alpha} \quad (30)$$

$$y'_2 = a' + f' \cot \alpha + \frac{f'(1 + \cot^2 \alpha)}{\cot \theta_2 + \cot \alpha} \quad (31)$$

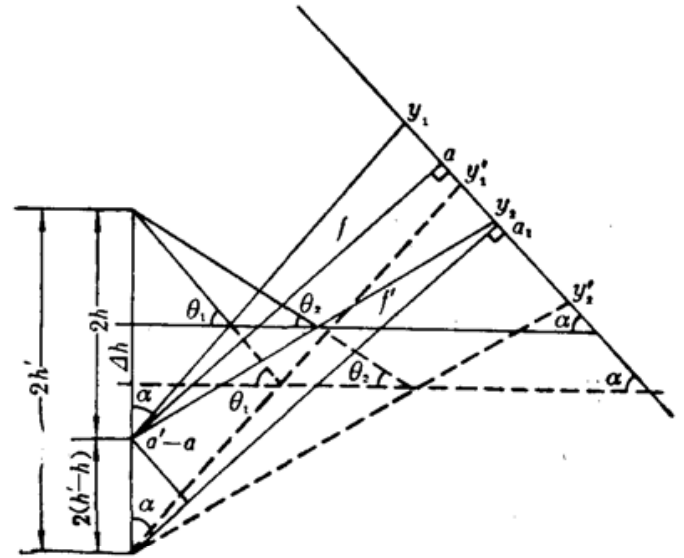


图 2 晶体平移

另外由图 2 的几何关系可得

$$f' - f = 2\Delta h \cos \alpha \quad (32)$$

$$a' - a = 2\Delta h \sin \alpha \quad (33)$$

这样, 在  $\alpha$  已知的情况下可由上述 6 个方程解得 6 个未知数  $a$ 、 $a'$ 、 $f$ 、 $f'$ 、 $\theta_1$  和  $\theta_2$ , 从而可以定出  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  以及其他谱线的波长值。

该方法在实验上比前述两种方法更为简便易行, 并且能在一次曝光中同时在同一底片上获得两条光谱, 这为实验和数据处理带来很大的方便, 且无需在晶体表面加光阑, 但在组装晶体时要保证两条晶体表面相互平行, 并要精确测定两晶体表面间距  $\Delta h$ 。也可采用两条不同晶面间距的晶体, 只要有两条谱线同时出现在所获得的两条光谱中。这样既能独立地确定未知波长值又能扩展谱仪的摄谱范围。实验工作正在进行中。

## 四、波长测量误差的估计

由(11)式可得

$$\cot \theta = \frac{f \sin \alpha - (y - a) \cos \alpha}{f \cos \alpha + (y - a) \sin \alpha} \quad (34)$$

由此可以推得

$$\Delta \theta = \frac{f \Delta(y - a) - (y - a) \Delta f}{f^2 + (y - a)^2} - \Delta \alpha \quad (35)$$

和

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \operatorname{tg} \theta \cdot \Delta \theta = \frac{f \cos \alpha + (y - a) \sin \alpha}{f \sin \alpha - (y - a) \cos \alpha} \left[ \frac{f \Delta(y - a) - (y - a) \Delta f}{f^2 + (y - a)^2} - \Delta \alpha \right] \quad (36)$$

另外, 由(28)~(33)可以解出

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{2\Delta h \cos \alpha} \left[ \frac{y'_2 - y'_1}{y_2 - y_1} - 1 \right] \quad (37)$$

可得

$$\frac{\Delta f}{f} = \left| \frac{\Delta(\Delta h)}{\Delta h} \right| + \left| \frac{\Delta(y_2 - y_1)}{y_2 - y_1} \right| \quad (38)$$

设  $\Delta h = 2 \text{ mm}$ ,  $\Delta(\Delta h) = 10^{-3} \text{ mm}$ ,  $y_2 - y_1 = 10 \text{ mm}$ ,  $\Delta(y_2 - y_1) = 4 \cdot 10^{-3} \text{ mm}$ , 则  $\frac{\Delta f}{f} \approx 10^{-3}$ 。设  $f = 75 \text{ mm}$ , 则  $\Delta f \approx 0.1 \text{ mm}$ 。

我们所用的 TLAP 晶体谱仪,  $\alpha = 68^\circ$ 。假设不计及  $\alpha$  的误差, 将  $f = 75 \text{ mm}$ ,  $\Delta f = 0.1 \text{ mm}$ ,  $y - a = 10 \text{ mm}$ ,  $\Delta(y - a) = 4 \times 10^{-3} \text{ mm}$  等数值代入(36)式, 得  $\frac{\Delta \lambda}{\lambda} \approx 5 \times 10^{-4}$ 。对  $\lambda = 1 \text{ nm}$  谱线  $\Delta \lambda$  值为  $5 \times 10^{-4} \text{ nm}$ , 这与通常用参考谱线方法测量波长的误差有同一量级。

### 参 考 文 献

- 1 B. Yaakobi *et al.*, *Phys. Rev.*, **A19**, 1247(1979)
- 2 J. D. Kilkenny *et al.*, *Phys. Rev.*, **A22**, 2746(1980)
- 3 P. G. Burkhalter *et al.*, *JOSA*, **B1**, 155(1984)
- 4 Zhang Chengchuan *et al.*, *Physica Scripta*, **35**, 798(1987)
- 5 Y. Conturie *et al.*, *JOSA*, **71**, 1309(1981)

(上接第 99 页)

$\eta = \frac{B_2/A_1}{B_1/A_2} = \frac{B_2 A_1}{B_1 A_2}$ 。总的合成和传输效率为 85%, 测量曲线如图 5 所示。

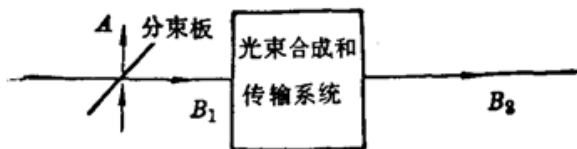


图 4 传输效率测量示意图

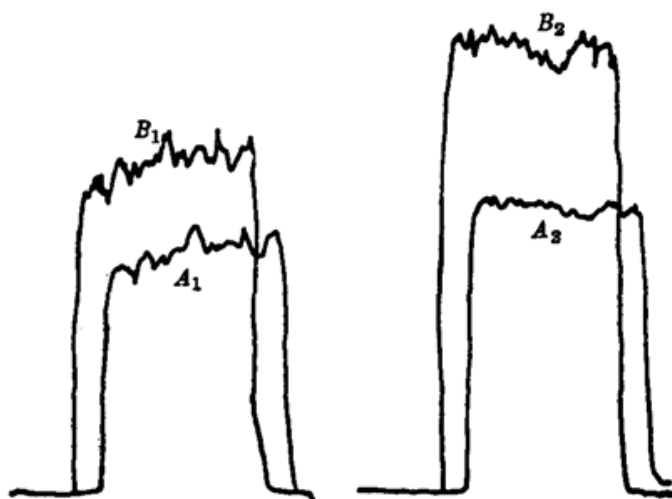


图 5 传输效率测量的函数记录仪扫描曲线

### 参 考 文 献

- 1 徐毓光 *et al.*, 中国激光, 待发表