

X 射线晶体衍射谱仪理论及应用

黎淼¹, 姚童¹, 王玺¹, 施军^{2*}, 王峰³, 杨国洪³, 尚万里³, 韦敏习³, 孙奥³

¹重庆邮电大学光电工程学院, 重庆 400065;

²重庆大学光电技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400044;

³中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900

摘要 基于晶体衍射的 X 射线诊断技术是大型激光装置及同步辐射装置上 X 射线光谱学诊断、材料分析与结构表征等研究领域获取关键状态参数的重要手段。基于动力学衍射理论的晶体衍射效率计算分析与基于不同面型晶体的谱仪结构设计是 X 射线晶体谱仪的两大基础研究方向。对 X 射线动力学衍射理论等经典晶体衍射理论、不同晶体对象衍射计算方法的发展来由和最新进展进行了总结讨论; 对不同结构 X 射线晶体谱仪的衍射聚焦特性、发展及应用进行了讨论; 综合阐述 X 射线晶体谱仪涉及的 X 射线晶体衍射理论及各种谱仪衍射聚焦特性方面的创新点和进步点以及总体发展态势。

关键词 X 射线光学; X 射线晶体谱仪; 晶体衍射; 光谱诊断; 动力学衍射理论

中图分类号 O536

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1134008

X-Ray Crystal Diffraction Spectrometer: Theory and Application

Li Miao¹, Yao Tong¹, Wang Xi¹, Shi Jun^{2*}, Wang Feng³, Yang Guohong³,
Shang Wanli³, Wei Minxi³, Sun Ao³

¹College of Optoelectronic Engineering, Chongqing University of Posts and Telecommunications,
Chongqing 400065, China;

²Key Laboratory of Optoelectronic Technology & Systems, Ministry of Education, Chongqing University,
Chongqing 400044, China;

³Laser Fusion Research Center, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, Sichuan, China

Abstract X-ray diagnosis technology based on crystal diffraction is an important method to obtain key state parameters in the research fields of X-ray spectroscopy diagnosis, material analysis and structural characterization on high energy laser devices and synchrotron radiation devices. The calculation of crystal diffraction efficiency based on the dynamical diffraction theory and the design of spectrometer structure based on different focusing schemes are the two main interests in the research of the X-ray crystal spectrometer. In this paper, the evolution and latest progresses of classical crystal diffraction theory such as X-ray dynamical diffraction theory and diffraction calculation method for different crystal objects are summarized and discussed. The diffraction focusing characteristics, development, and application of X-ray crystal spectrometers with different geometries are discussed, and the X-ray crystal diffraction theory involved in the X-ray crystal spectrometer and the innovation and progresses of the focusing characteristics of various spectrometers, as well as the overall development trend, are comprehensively expounded.

Key words X-ray optics; X-ray crystal spectrometer; crystal diffraction; spectrum diagnosis; dynamical theory of diffraction

收稿日期: 2022-01-27; 修回日期: 2022-02-28; 录用日期: 2022-03-03

基金项目: 国家自然科学基金(61604028, 11775203, 12075219)、重庆市留学创新基金(cx2018023)、等离子体物理重点实验室基金(6142A04180207)

通信作者: *shijun@cqu.edu.cn

1 引言

基于晶体衍射元件的 X 射线光谱测量技术是大型激光装置^[1-4]、同步辐射装置^[5-6]及实验室领域 X 射线光谱学诊断、X 射线发射谱(XES)检测、X 射线吸收精细结构(XAFS)材料分析与表征等^[7]的重要方法和技术手段。1912 年 Friedrich 等^[8]完成了第一个 X 射线晶体衍射实验后, Bragg^[9]在 1913 年推导出了 Bragg 定律来描述晶体衍射现象, 此后基于衍射晶体元件的 X 射线晶体谱仪逐渐成为 X 射线诊断技术的重要手段^[10-11]。

在 X 射线晶体谱仪诊断技术中, 晶体谱仪的衍射方式可分为 Bragg 型(反射式)和 Laue 型(透射式), 衍射类型与晶体晶面指数的选择主要取决于射线通量需求与能量诊断范围。目前单晶衍射谱仪的诊断能量范围为 250 eV(有机马来酸盐单晶)~100 keV[Quartz(502)晶体, 掠入射角为 5°], 能量小于 250 eV 的超软 X 射线光子通常采用衍射光栅手段探测^[12], 而大于 100 keV 的硬 X 射线能谱常用 Gamma 谱仪诊断。与其他谱仪相比, 晶体谱仪结构简单、操作方便, 探测 X 射线光谱时具有较高的光谱分辨率。在大型激光装置等离子体 X 射线光谱探测中, Bragg 型 X 射线晶体谱仪一直得到较为广泛的应用, 如弯曲晶体耦合分幅相机和条纹相机可以获取靶丸聚爆过程的时间和空间演化过程, 为辐射驱动与靶丸的最佳耦合设计提供实验依据^[13]。本文也主要针对 Bragg 型衍射晶体谱仪展开相关讨论分析。

实际上, 衍射晶体元件实现的 X 射线衍射并不严格遵循 Bragg 定律。根据晶体组分、结构、晶格取向和几何形状, 具有给定波长的射线在接近 Bragg 角的有限角度范围内会发生衍射, 相关衍射效率主要取决于波长、偏振度、晶体完美程度和弯曲半径等^[14-15]。因此, X 射线晶体谱仪的一个重要研究方向是对晶体中 X 射线衍射过程的精确计算描述, 而目前, 各类实验中晶体谱仪的 X 射线衍射聚焦计算主要是基于动力学衍射理论完成的, 本文主要围绕动力学衍射理论对 X 射线晶体元件衍射效率进行探讨。X 射线晶体谱仪的另一研究方向是设计基于特殊面型晶体元件的衍射聚焦结构, 以满足不同领域 X 射线高分辨率诊断应用的需求。对各类 X 射线诊断系统而言, 同时具备空间分布-谱线分布诊断能力的新型面型结构晶体元件的使用将极大增强 X 射线晶体谱仪的诊断潜力^[16]。

本文总结了以动力学衍射理论为主的晶体谱仪衍射效率的基础理论及发展趋势, 探讨了一系列广泛应用于 X 射线光谱测量的 Bragg 型弯曲晶体衍射谱仪结构; 分析了各种聚焦结构的光谱分辨率、线色散率及成像分辨率等谱仪特性; 最后讨论分析了 X 射线弯曲晶体谱仪的未来发展方向。

2 完美晶体元件衍射效率计算理论

现代晶体学应用散射或衍射方法, 利用 X 射线、中子或电子在晶体中的衍射或散射效应获得晶体材料内部结构信息。深入研究晶体材料的内部结构, 目前主要有两个主要研究方向: 一个是晶体结构分析, 另一个是晶体完美性的评定。通常运用衍射运动学理论或衍射动力学理论对衍射晶体学的实验结果进行解析^[17]。X 射线晶体衍射基本原理通常认为 X 射线入射到晶体上后将受到晶体原子散射, 由于晶体原子间距与 X 射线波长的数量级相近, 且晶体原子呈规则的周期性排列, 经晶体原子散射后的散射射线之间具有一定的相位和光程差关系, 即在某一确定方向上各原子的散射波互相干涉加强, 形成衍射射线, 根据干涉加强条件可知此时散射射线之间的光程差等于入射 X 射线波长的整数倍^[18]。

对于基于晶体衍射原理的 X 射线晶体谱仪系统或其他 X 射线光学元件, 基本上都利用晶体衍射 Bragg 方程进行衍射聚焦的简单描述^[9]:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1)$$

式中: d 为晶面间距; θ 为入射 X 射线与晶格面夹角; n 为衍射级次; λ 为 X 射线波长。

通过 Bragg 方程, 对于已知晶面间距 d 的给定晶体材料, 可以获得不同的入射 X 射线波长(能量)不同的衍射级次 n 对应的入射 X 射线与晶格面夹角 θ , 已知 λ, θ, d 三者中的任意两个即可确定另一参数。但 Bragg 方程仅是一个近似几何公式, 对于完美大块晶体衍射角度和衍射强度的定量计算, 仍然必须依赖 X 射线衍射理论。在关注 X 射线晶体谱仪新型面型结构研究进展之前, 首先讨论与衍射晶体元件衍射效率密切相关的 X 射线晶体衍射理论发展。

2.1 完美晶体运动学衍射理论

晶体运动学衍射理论是适用于研究小尺寸完美晶体 X 射线衍射现象的基础衍射理论, 其基本假设为小尺寸完美晶体近似, 即认为产生衍射的晶体尺寸极小, 以至于衍射射线的振幅比透射射线振幅小得多, 可完全忽略衍射射线与透射射线的相互作用,

并认为晶体各处的透射射线强度是完全相同的。由于小尺寸单晶结构生长难度系数小,并且大多数工程材料本质上可看作许多小尺寸晶体组成的多晶结构,因此 X 射线在化学和材料科学中的大多数经典应用(如结构确定、相分析等)在前期理论上都是基于运动学衍射理论的。

X 射线运动学衍射理论只考虑了单个原子与入射波的相互作用,忽略了原子间多重散射以及入射波与衍射波可能存在的相互作用。基于“忽略初级消光,每个电子只散射一次”“入射和散射 X 射线波长和振幅均相对,仅考虑相位差”两个基本假设,获得了经典 X 射线运动学衍射强度分布^[19-20]。值得一提的是,衍射强度的计算按衍射方法不同而不同,但其本质都是从电子散射、原子散射到一个晶胞衍射,最终获得小晶体衍射强度分布,如经典的粉末衍射积分强度^[21]。此类运动学衍射强度公式考虑了多种影响因素,如结构因子、形状因子、洛伦兹偏振因子、吸收因子及温度因子等。由于假设条件过于完美,运动学衍射理论具有明显的缺陷,如由于单原子散射近似,衍射射线强度为各原子衍射波的叠加,衍射射线强度随穿透深度增加应该不断增大,但入射射线强度却不变,这一结果不满足能量守恒定律,缺乏自洽性。运动学衍射理论在衍射射线强度较小、入射与衍射相互作用较弱的条件下才满足理论假设条件,即适用于对粉末晶体或小而“薄”晶体进行衍射分析。

在 X 射线晶体谱仪应用领域,相比通过选用已知晶胞形状与大小的衍射晶体元件实现特定能量范围内 X 射线的衍射聚焦,人们更为关注随入射角度变化而变化的衍射强度分布计算的精确性,在理论上需要更为普遍适用且较精确的晶体元件衍射理论进行仿真计算,完成射线光谱诊断的实验预测及验证工作,因此晶体动力学衍射理论是晶体谱仪研究领域更合理的衍射效率计算方法。

2.2 完美晶体动力学衍射理论

2.2.1 基于 Darwin 理论的晶体衍射效率

1914 年 Darwin^[22] 首先提出了一种利用物理光学处理方法获得 X 射线衍射强度的动力学衍射理论。该理论考虑了 X 射线与物质的相互作用,利用递推方程描述每个晶格平面上透射波和衍射波,最后求解递推方程获得 X 射线衍射强度。Darwin 理论首先应用于晶格平面与晶体表面平行的对称 Bragg 衍射,如图 1 所示,将原子平面用 0、 $r-1$ 、 r 、 $r+1$ 分别表示。考虑 $r-1$ 、 r 以及 $r+1$ 之间的透

射波 T 与衍射波 S 之间的消长关系,第 r 层的衍射波 S_r 分为 r 层直接衍射波和 $r+1$ 层衍射波的透射部分;类似地,第 r 层的入射波 T_r 分为透过 $r-1$ 层的透射波及在 $r-1$ 层衍射的第 r 层衍射波,递推得到不考虑吸收效应即晶体为完美晶体情况下的动力学衍射方程和出射面衍射强度比。

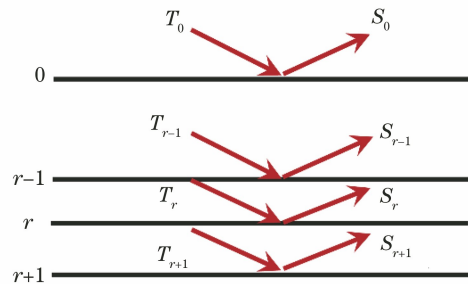


图 1 Darwin 差分方法图解

Fig. 1 Schematic diagram of the Darwin differential method

$$\begin{cases} S_r = T_r(-iq) + (1 - iq_0)S_{r+1}\exp(-i\varphi) \\ T_r = T_{r-1}(1 - iq)\exp(i\varphi) - iqS_r\exp(-2i\varphi) \end{cases}, \quad (2)$$

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-if}{i\Delta\theta \pm (f^2 - \Delta\theta^2)^{1/2}}, \quad (3)$$

式中: q 为单层原子面的衍射能力; φ 为相位差; $f = q\lambda / (2\pi d \cos \theta) = \Delta\theta q / v$, $v = 2\pi d \Delta\theta \cos \theta / \lambda$ 。 R_t 表示透射率,其由两部分组成,直接透射的部分在不考虑吸收效应时设为 1,而经过晶格面两次衍射强度值为 q_0 ,即有 $R_t = (1 - iq_0)$,进一步可得到晶体积分衍射效率^[23]为

$$R_c = \int P(\theta) d\theta = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{N_c \lambda^2}{\sin 2\theta} |F| \frac{1 + |\cos 2\theta|}{2}, \quad (4)$$

式中: $P(\theta)$ 为晶体摇摆曲线函数; m 为电子质量; c 为光速; e 为单位电子电荷; N_c 为单位体积内的晶胞数; F 为结构因子。

式(4)即为完美晶体 Darwin 曲线。Darwin 差分求解衍射动力学方程理论忽略了吸收效应,后来由 Prins^[24] 推导获得了考虑吸收效应的晶体 Darwin-Prins 曲线,取代全反射区的是吸收效应导致的不对称峰。此外,Darwin 衍射动力学理论也被 Borie^[25] 进一步推导,应用于对称 Laue 衍射条件下的晶体衍射分析中。

2.2.2 基于 Ewald-Laue 理论的晶体衍射效率

1917 年 Ewald^[26] 从微观角度将晶格内电偶极子视作衍射单元,在考虑入射波为平面波的基础上,通过计算电偶极子单元激发出波场的叠加来获得衍

射波,即利用赫兹矢量求解波动方程,从而获得完美晶体中 X 射线动力学衍射基本方程。该方程为

$$\begin{cases} \mathbf{E}_h = \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} \sum_{h'} \chi_{h'} \mathbf{E}_{h'[h]}, \\ \mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 - \mathbf{h} \end{cases} \quad (5)$$

式中: k 为真空中波矢大小; \mathbf{K}_0 为入射波矢; \mathbf{K}_h 为晶体内衍射波矢; \mathbf{h} 为倒易空间倒格点; $\mathbf{E}_{h'[h]}$ 为 \mathbf{h}' 方向的电场强度矢量在垂直于 \mathbf{h} 方向平面上的投影; $\chi_{h'}$ 为傅里叶级数形式的晶体介电常数的 \mathbf{h}' 分量。

1931 年 Laue^[27-28] 从晶体宏观电学量分析考虑,基于宏观电学量的连续周期结构特性,将晶体内部介电常数看作和晶体类似的三维周期结构物理量,基于傅里叶级数形式的介电常数,从麦克斯韦方程组推导得到与 Ewald 衍射动力学方程等价的 Laue 衍射动力学方程。关于电位移矢量的完美晶体 X 射线动力学衍射的基本方程为

$$\mathbf{D}_h = \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} \sum_{h'} \chi_{h-h'} \mathbf{D}_{h'[h]}, \quad (6)$$

式中: $\mathbf{D}_{h'[h]}$ 为 \mathbf{h}' 方向电位移矢量在垂直于 \mathbf{h} 方向平面上的投影。

对 X 射线衍射研究而言,Ewald-Laue 动力学衍射理论是等价的完美晶体 X 射线动力学衍射基本理论,可以推导得到 Laue 几何条件或者 Bragg 几何条件下平面波入射完美晶体的衍射效率和透射效率,比 Darwin 理论更成熟易用,在 Ewald-Laue 动力学衍射理论基础上也进一步发展出了众多相关的重要结论^[29]。譬如,当晶体内部仅有单个平面波时可以进一步推导得到折射率公式;Molière^[30] 也采用量子理论验证并解释了连续分布电极化率的 Laue 动力学衍射理论;Kato^[31] 在尖劈形 Si 单晶中观察到“钩”状 Pendellösung 条纹后,采用傅里叶变换将入射球面波用平面波场表示,在色散面对所有衍射平面波进行积分,获得衍射强度分布。Kato 的研究工作不仅将 Ewald-Laue 完美晶体动力学衍射理论应用至球面波场,更拓展了面向任意入射波场及晶体缺陷的 X 射线动力学衍射计算方法。

对于大尺寸晶体,传统运动学晶体衍射理论已不再适用。动力学晶体衍射理论考虑了透射射线与衍射射线的相互作用,是一种适用于大尺寸晶体 X 射线衍射的研究理论。传统 X 射线晶体衍射理论的应用领域,如 X 射线形貌术、X 射线干涉仪、X 射线衍射应力分析、X 射线谱仪等技术都是针对近完美晶体衍射现象展开的,主要关注正空间衍射强度分布,通常应用衍射动力学理论仿真验证这些分布。

3 非完美晶体动力学衍射理论及应用

在晶体衍射诊断技术发展过程中,单晶异质结构和多层材料的生成使得动力学衍射理论得到了快速发展,完美晶体的衍射动力学理论也得到了各种实验证实。但随着晶体诊断技术的发展,人们发现所制备的单晶元件难免由于温度或各种应力引入晶格畸变等问题,诊断实验对晶体不完美的表征也越来越重要^[17]。理论上,完美或近完美晶体 X 射线衍射动力学理论中晶体波场由一组平面波叠加而成,而实际晶体元件存在不同类型的缺陷,X 射线波在这样的晶体内传播,其波前会发生畸变,而使波场的等相位面一般不为平面。为了解释实际非完美晶体的 X 射线衍射行为,必须研究畸变晶体 X 射线衍射动力学理论。

3.1 Multi-Lamellar 多层近似法动力学衍射理论

White^[32] 于 1950 年提出多层近似方法 (Multi-Lamellar),用来解决形变晶体衍射强度的计算问题。Egert 等^[33] 得到的优化计算方法被广泛应用于 X 射线晶体谱仪的诊断仿真计算中。2015 年,del Rio 等^[34] 在经典分层理论基础上进一步构建了更为简单的针对 Bragg 衍射结构和 Laue 衍射结构的分层晶体衍射效率模型,并将其实际应用在 X 射线光学仿真程序 XOP^[35] 的弯曲晶体衍射效率计算模块中。

del Rio 等所采用方法的核心是在射线入射方向上,将晶体视为若干厚度适当的多层完美晶体结构,进而通过完美平面晶体动力学衍射计算方法来获得形变晶体的衍射强度。为了尽可能保证形变晶体的表面形状,利用 Multi-Lamellar 方法进行分层近似,每一晶体薄层都有着不同的倾斜度,如图 2 所示。在 Multi-Lamellar 方法中,厚度为 T 的弯曲晶体被分解成若干厚度为 ΔT 的完美平面晶体。通过计算 J 层晶体,可得到整个晶体总衍射率 R_r ,对于 Bragg 晶体衍射,有^[36]

$$R_{\text{Bragg}} = \sum_{j=1}^J \left\{ r_j^{(\text{Bragg})} \exp[-\mu(j-1)S_H] \prod_{k=0}^{j-1} t_k^{(\text{Bragg})} \right\}, \quad (7)$$

式中: $S_H = \Delta T / \gamma_h$ 为所假设单层晶体中 X 射线衍射路径, γ_h 为衍射射线在晶面法线方向投影; μ 为晶体材料的吸收系数; r_j 和 t_j 分别为第 j 层的衍射系数和透射系数;上标 (Bragg) 和 (Laue) 分别代表 Bragg 衍射和 Laue 衍射。对于 Laue 衍射,有

$$R_{\text{Laue}} = \sum_{j=1}^J \left\{ r_j^{(\text{Laue})} \exp[-\mu(J-j)S_H] \prod_{k=0}^{j-1} t_k^{(\text{Laue})} \right\}. \quad (8)$$

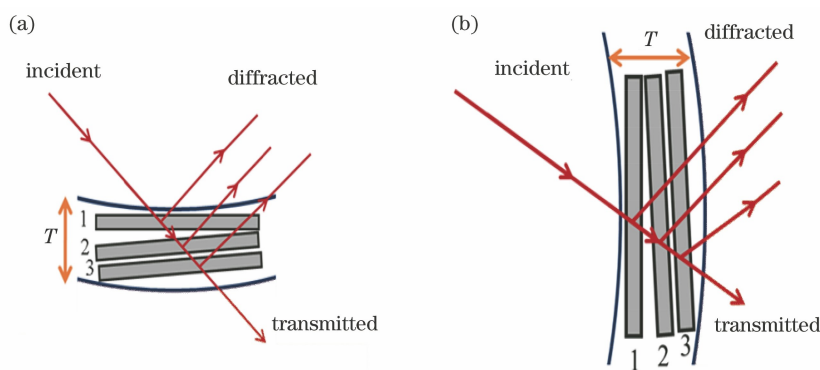


图 2 Multi-Lamellar 近似动力学衍射计算模型^[35]。(a) Bragg 晶体; (b) Laue 晶体

Fig. 2 Multi-Lamellar approximate dynamic diffraction calculation model^[35]. (a) Bragg crystal; (b) Laue crystal

基于多层近似方法的动力学衍射计算理论由于模型相对简单,在 X 射线晶体谱仪衍射效率仿真计算方面具有较为广泛的应用,但要求形变晶体的曲率不能太大,否则无法考虑晶体平面内产生的局部应变,主要适用于计算具有足够厚度的弯曲晶体衍射强度,如果晶体厚度等于或小于近似薄片厚度,该理论则不适用。

近年来,对基于多层近似方法的动力学衍射计算理论模型的研究主要集中在实验数据校正与模型优化方面。2021 年, Wu 等^[37]利用 XOP 多层近似

仿真计算模块系统研究了 50.8 mm 曲率半径的柱面弯晶基于 2.5~7.5 eV 同步辐射源实验数据的校正优化。通过考虑 X 射线源展宽与能量分辨率、诊断仪器响应函数、实验过程中的针孔效应,建立了基于实验校正数据的摇摆曲线前向卷积模型。如图 3 所示,该模型计算获得的 4 种不同曲率半径摇摆曲线结果与 ALS 光源 (beamline 9.3.1 at the Advanced Light Source) 实验结果基本一致,验证了结合实验校正数据的多层近似动力学衍射模型的实用性。

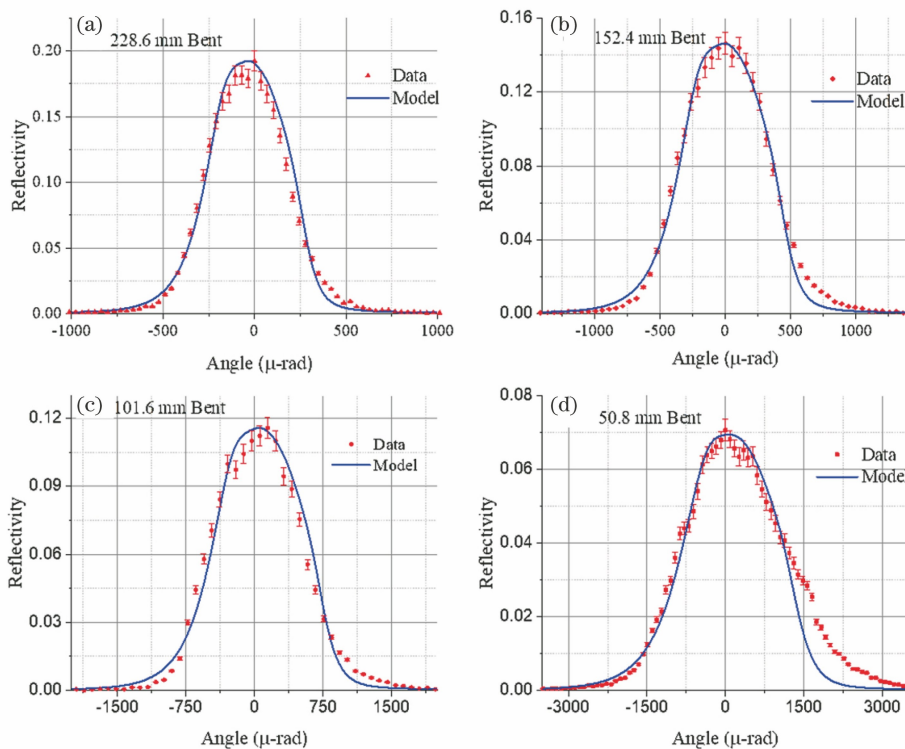


图 3 多层近似模型对不同晶体摇摆曲线的校正结果^[37]。(a) 228.6 mm; (b) 152.4 mm; (c) 101.6 mm; (d) 50.8 mm

Fig. 3 Correction results of rocking curves of different crystals by multilayer approximate model^[37].

(a) 228.6 mm; (b) 152.4 mm; (c) 101.6 mm; (d) 50.8 mm

3.2 Penning-Polder 方程动力学衍射理论

在多层近似理论基础上, Penning 和 Polder^[38] 提出另一种基于分层模型理论的形变晶体衍射强度计算方法 (Penning-Polder 理论), 采用更为细化的分层模型对形变晶体内部的 X 射线衍射现象进行了解释。在 Penning-Polder 理论中, X 射线可以分成足够窄的光束, 以至于在分光射线衍射过程中晶体可认为是完美晶体, 此方法将形变晶体中的 X 射线假定为与局部 Poynting 矢量平行传播的伪平面布洛赫波; 此时形变晶体假设为是由平面未形变晶体组成的, 因此可以采用完美晶体动力学衍射理论。另一方面, Penning-Polder 理论假设弯曲形变晶体内部有一个可以通过晶体应变关系算出的恒定应力梯度 β , 通过 β 可以得到晶体衍射率。Penning-Polder 理论进一步被 Balibar 等^[39-40] 改进。2015 年, del Rio 等^[34] 进一步将 Penning-Polder 理论应用至 XOP 非完美晶体衍射效率计算模块^[35] 中, 其

主要方法假设对于厚度为 T 的晶体, 应变梯度 β 恒定:

$$2\eta = \xi_e - b/\xi_e = \xi_i - b/\xi_i + 2\beta T, \quad (9)$$

式中: 下标 e, i 分别表示出射面, 入射面; ξ 为晶体中衍射波和透射波振幅比; b 为非对称因子; η 为归一化角度偏转因子。

通过求解式(9)^[38] 可得到晶体中衍射波和透射波振幅比 ξ 。获得 ξ_i 和 ξ_e 的表达式为

$$\begin{cases} \xi_{e,1} = \eta + \sqrt{\eta^2 - b} \\ \xi_{e,2} = \eta - \sqrt{\eta^2 - b} \\ \xi_{i,1} = \eta - \beta T + \sqrt{(\beta T - \eta)^2 - b} \\ \xi_{i,2} = \eta - \beta T - \sqrt{(\beta T - \eta)^2 - b} \end{cases}, \quad (10)$$

这两个解对应于入射面 ($\xi_{i,j'}, j' = 1, 2$) 和出射面 ($\xi_{e,j'}, j' = 1, 2$) 处的衍射波和透射波振幅。根据 Penning-Polder 理论, 入射射线强度 I_0 、衍射射线强度 I_R 、透射射线强度 I_T 具有如下关系:

$$\begin{cases} \frac{I_{T,j'}}{I_0} = \frac{b}{\xi_{e,j'}^2 + b} \cdot \frac{b}{\xi_{e,j'}^2 + b} \exp\left\{-\frac{\mu T}{\gamma_0} \left[1 + \frac{b-1}{2\beta T} (\xi_{e,j'} - \xi_{i,j'}) + \frac{b}{\beta T} \cdot \frac{\Im\sqrt{\psi_H\psi_{\bar{H}}}}{\Im\psi_0} \ln \frac{\xi_{e,j'}}{\xi_{i,j'}}\right]\right\} \\ R_{j'} = \frac{I_{R,j'}}{I_0} = \frac{\xi_{e,j'}^2}{b} \cdot \frac{I_{T,j'}}{I_0} \end{cases}, \quad (11)$$

式中: \Im 表示函数虚部; ψ_0 为晶体电极化率; ψ_H 为晶体电极化率与结构因子 H 相关的傅里叶分量; $\psi_{\bar{H}}$ 为晶体电极化率与结构因子 \bar{H} 相关的傅里叶分量。通过将衍射射线强度与透射射线强度相加 (一个通常很小) 并消除所创建波场的强度来获得总反射率 R_T :

$$R_T = R_1 + R_2 = \left(\frac{I_{R,1}}{I_0} + \frac{I_{R,2}}{I_0}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi\beta_c}{|\beta|}\right)\right], \quad (12)$$

式中: 引入的临界应变梯度 $\beta_c = \pi/(2\Lambda_{\text{pend}})$, Λ_{pend} 为与消光深度 Λ 相关的 Pendellösung 深度^[34]。

Penning-Polder 理论在生成晶体内部射线轨迹方面很简单, 主要考虑到晶体畸变不大的条件下, 在色散面上的波场上可以得到相应连结点能流的能量传播途径, 即波的轨迹。但计算过程中仅考虑了两个互不干扰的波场, 因此, 该理论模型的仿真无法获得 Pendellösung 条纹, 主要应用在晶格面的取向差远小于完美晶体本征反射宽度的晶体衍射情况, 也可以用来计算强扭曲晶体的衍射强度。Penning-Polder 理论模型的本质是将入射 X 射线分割成若

干足够窄的小光束, 在每一个小光束宽度范围内, 被照射晶体可视为近似完美晶体, 从而计算有应变场的畸变晶体内波场关系。只有晶体畸变非常小的情况下该理论才较为适用, 在 X 射线晶体谱仪衍射仿真中通常应用 Laue 型非完美弯曲晶体衍射效率计算理论。

3.3 Takagi-Taupin 动力学衍射理论及典型应用

随着衍射晶体制备技术及 X 射线衍射形貌技术的不断发展, X 射线衍射动力学理论逐渐得到实验验证。为了合理解释实验中观察到的晶体缺陷衍射现象, 采用几何射线光学理论推导了轻微畸变晶体内部 X 射线衍射计算方法, 获得了诸如 Multi-Lamellar 近似模型、Penning-Polder 模型等一系列针对非完美晶体衍射情况的理论模型, 这些畸变晶体动力学衍射计算方法普遍都把晶体分为多层结构。除此之外, Takagi 等^[41-43] 分别独立研究并推导了任意形状波阵面入射射线在畸变晶体内部的衍射动力学理论。在 Laue 推导出的晶体内部传播波场电位移矢量方程基础上, 将晶体内波场分为传输波场和衍射波场, 通过将晶体介电常数分布假设为周期性傅里叶级数形式 $\chi(\mathbf{r}') = \sum \chi_h \exp\{2\pi i h [\mathbf{r}' -$

$u(\mathbf{r}')$] , 其中 $u(\mathbf{r}')$ 为畸变晶体 \mathbf{r}' 位置的位移矢量, 衍射电位移矢量 \mathbf{D}_h 设为与晶体内部位置相关量 $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \sum \mathbf{D}'_h(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i[\mathbf{K}_h \mathbf{r} - \mathbf{h}u(\mathbf{r})]\}$, 考虑畸变晶体坐标矢量有近似关系 $\mathbf{r} = \mathbf{r}' - u(\mathbf{r}')$, 推导得到双光束近似下的 Takagi-Taupin 方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{D}'_0(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{s}_0} = -i\pi K C \chi_h \mathbf{D}'_h(\mathbf{r}) \\ \frac{\partial \mathbf{D}'_h(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{s}_h} = i2\pi K \beta_h \mathbf{D}'_h(\mathbf{r}) - i\pi K C \chi_h \mathbf{D}'_0(\mathbf{r}) \end{cases}, \quad (13)$$

式中: K 为真空中 X 射线波数; χ_h 和 $\chi_{\bar{h}}$ 分别为波场在晶体中衍射波方向和反方向的介电常数; \mathbf{s}_0 为入射波矢量方向; \mathbf{s}_h 为衍射波矢量方向; C 为偏振因子(1 或 $\cos 2\theta_B$, θ_B 为 Bragg 角); $\beta_h = \beta'_h + \frac{1}{K} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_h}(\mathbf{h}u)$, $\beta'_h = [k'_h(\mathbf{r})^2 - k^2]/(2K^2)$, 晶体内平均波数 $k = K(1 + \chi_0)^{1/2}$ 。Takagi-Taupin 方程虽然为数学表达式不同的两组方程, 但是具有相同的物理本质, 通过波矢 \mathbf{k}_0 的选择可以实现形式上的变换, 且由于介电常数 $\chi_0 \approx 10^{-5}$, 所以 $|\Delta \mathbf{k}_0| \ll K$, 所描述波场始终具有缓慢变化性质, 适合用来解决二维缓慢变化形变场的衍射问题^[44]。

Takagi-Taupin 方程是一组具有普适性的双曲型偏微分方程组, 是目前公认的 X 射线衍射动力学的普遍理论, 可以处理畸变晶体和任意形状波阵面的入射射线衍射问题。通常情况下可以通过设定边界条件, 根据双曲型方程特征求出晶体内部各处的波场, 得到出射面衍射效率和透射效率。然而, Takagi-Taupin 方程在大多数情况下都只能获得数值解, 只有在特定条件的简化模型里, 可以得到衍射效率解析表达式。近年对 Takagi-Taupin 方程在不同条件下的求解仿真是晶体谱仪衍射效率理论研究方向的一个热点, 其本质为针对不同晶体衍射条件, 将原本需要复杂解析的衍射分布计算简化为求解具有不同对应的边界条件偏微分方程。边界条件主要包括晶体、晶体内扭曲场边界、入射 X 射线场边界条件等。

利用有限差分法求解 Takagi-Taupin 方程在 X 射线衍射追迹的仿真工程领域, 如 ESRF 的 XOP 程序中已经得到实际应用^[45-46], 能够较容易应用于 X 射线衍射仿真与分析工程问题, 在处理离散化空间基本单元时, 能够非常灵活地选择方程离散化方式。其缺点在于, 虽然在直角坐标系网格中比较容

易实现有限元求解, 但在畸变扭曲的任意形状网格中比较复杂。

2014 年 Yan 等^[47]建立了一种基于级数展开迭代求解的 Takagi-Taupin 积分方程模型, 应用该模型计算了 Si(004) 单晶在 12 keV 平面波入射条件下的动力学衍射结果, 获得了晶体内部入射波、衍射波以及 Poynting 矢量(能流密度)分布, 该模型可以求解任意形状及应力分布条件下单晶 X 射线动力学衍射分布。如图 4 所示, 根据模型计算结果, 在 Bragg 衍射区, 由于入射角处的衍射效应相对较弱, 能量不再沿晶格表面传播, 而是沿与晶体表面倾斜一定角度的方向流动。其仿真结果也展示了完美单晶中的角放大效应^[29], 即入射角 $10 \mu\text{rad}$ 的变化会导致能量方向变化超过 10° 。图 4(b)~(d) 为晶体内部入射波、衍射波以及 Poynting 矢量(能流密度)分布; 图 4(f)~(h) 为 0° 偏差入射(理想 Bragg 角)时晶体内部入射波、衍射波以及 Poynting 矢量(能流密度)分布。与基于有限差分方法的数值计算方法相比, Yan 等^[47]建立的迭代求解方法能够产生自动满足边界条件的解, 使得该模型能够同时应用于 Bragg 或 Laue 结构衍射情形。

除了以上求解方法外, Takagi-Taupin 方程也可以通过有限元方法求解, 但一般而言, 有限元求解在直角坐标系网格中比较容易实现, 在畸变扭曲的任意形状网格中难以实现求解。2018 年, Honkanen 等^[48]采用有限元计算方法, 通过求解弱形式 Takagi-Taupin 方程, 获得不同厚度柱面弯曲 Si(111) 晶体摇摆曲线、衍射强度分布, 完成了对称几何结构畸变弯晶元件聚焦特性的对比分析。在以入射波和衍射波方向为坐标轴的斜坐标系基础上, 利用该有限元模型, 推导获得了修正形式的 Takagi-Taupin 方程; 针对 Bragg 衍射结构, 定义了有限元分块里的多种边界条件, 并采用 COMSOL Multiphysics 程序完成了弱形式 Takagi-Taupin 方程求解。所建立的二维有限元模型能够针对任意形状及畸变晶体展开 X 射线动力学或中子衍射问题的相关分析^[49], 具有较好的鲁棒性和稳定性。

基于 Takagi-Taupin 理论模型的衍射机理及过程的准确描述是 X 射线衍射晶体谱仪的主要研究方向之一, 目前各类仿真计算程序普遍都采用数值计算方法或有限元模型方法^[50]。X 射线晶体谱仪作为 X 射线晶体衍射应用方向之一, 其相关理论研究一方面可以针对谱仪诊断应用场景, 建立简化入射波或出射波的表达式, 从而实现更易求解的偏微

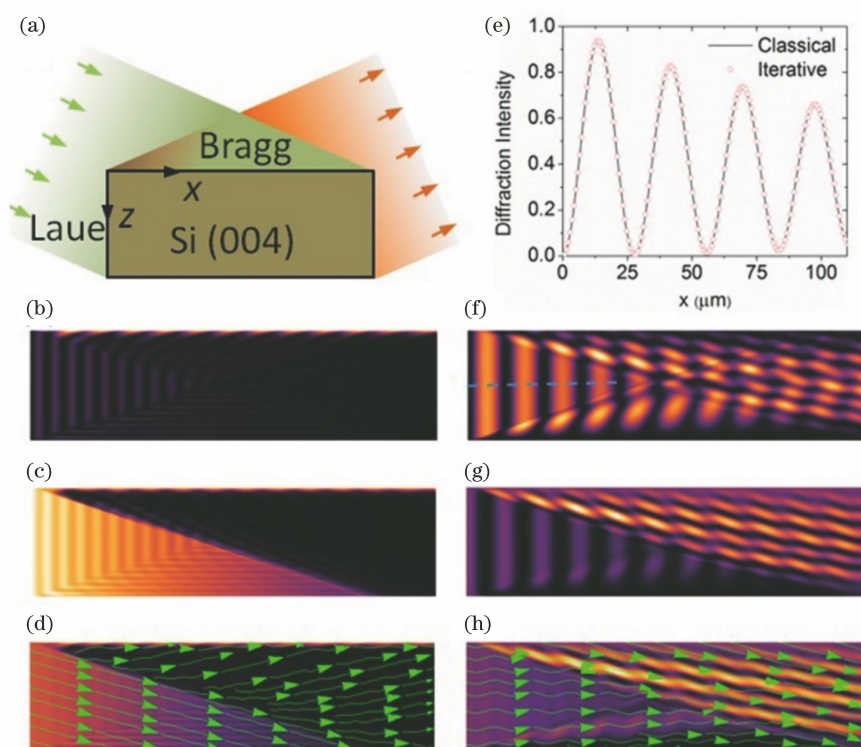


图 4 Si(004)单晶在 12 keV 平面波入射条件下的动力学衍射结果^[47]。(a)仿真光路模型;(b)衍射波;(c)出射波;(d)能流密度;(e)衍射强度;(f) 0°偏差入射衍射波;(g) 0°偏差入射出射波;(h) 0°偏差入射能流密度

Fig. 4 Dynamic diffraction of Si(004) crystal with a 12-keV planewave^[47]. (a) Simulated optical path model; (b) diffracted wave; (c) transmitted wave; (d) energy flow; (e) diffracted intensity; (f) diffracted wave in 0° deviation angle; (g) transmitted wave in 0° deviation angle; (h) energy flow in 0° deviation angle

分方程组简化形式;另一方面,也可以引入一些较为先进的偏微分方程求解方法。

4 X 射线晶体谱仪聚焦结构及典型应用

X 射线晶体谱仪采用晶体元件作为衍射聚焦元件来获取 X 射线能谱信息,前文介绍的 X 射线晶体衍射理论研究是目前 X 射线晶体谱仪研究工作的主要方向之一。实际 X 射线晶体谱仪更需要结合不同的诊断需求构成不同聚焦结构谱仪,主要目的是在理论研究确定晶体材料、入射 Bragg 角及衍射效率分布后,通过合理的面型设计使得晶体元件接收范围内尽可能多的射线达到最高衍射效率,对于聚焦成像系统则需要满足最优成像放大比等需求^[51]。最基础的晶体谱仪是采用平面晶体作为衍射聚焦元件的平晶谱仪,具有结构简单、加工难度低等优点^[52-54],然而平晶谱仪的射线收集效率较低且谱线强度弱,衍射聚焦效率较低^[55]。平晶谱仪在对光谱分辨率要求不高的情况下,是一种较为理想的 X 射线诊断仪器^[56-57]。当要求获得强聚焦、高分辨率成像光谱图时,平晶谱仪将不能获得理想成像结果。为了克服平晶谱仪不具有强聚焦能力的缺点,

各种基于弯曲晶体元件的谱仪结构获得更加广泛的研究和应用。

4.1 常用晶体谱仪衍射聚焦结构

与平晶谱仪相比,采用弯曲形变晶体作为衍射聚焦元件的弯晶谱仪具有相对更强的聚焦能力,能够获得高分辨率能谱信息。晶体面的弯曲同时允许空间方向(垂直于色散方向)相同波长 X 射线以相同的 Bragg 角在晶体面上衍射聚焦,提高了射线光子收集效率。聚焦型曲面晶体结构中,射线源位于晶体旋转对称轴上,在子午面(光谱方向)射线源发射的不同波长(能量)X 射线满足 Bragg 方程并沿晶体表面色散,因此能够得到 X 射线源的能谱信息;在弧矢面(空间方向垂直于子午面),相同波长的 X 射线以相同的 Bragg 角衍射聚焦到对称轴上得到单能射线源像。如果对称轴上的射线源是理想点源(如激光等离子体)或线源(如 Z 箍缩等离子体),聚焦得到的单能像则为点或一条线。弧矢面聚焦的单能像体现射线源的空间分布,因此利用聚焦型曲面晶体能够同时获取等离子体能谱和空间分布信息,多用于空间非均匀等离子体的诊断。

常用弯晶聚焦结构有两类,即 Johann 型^[58-59] / Johansson 型^[60] 与 von Hamos 型^[61]。Johansson 型聚焦结构是 Johann 型的改进,曲率半径为 R 的弯晶被研磨后能够与半径为 $R/2$ 的罗兰圆相吻合;相对于 Johann 型聚焦结构,它消除了几何像差;而 von Hamos 型聚焦结构中,晶体的衍射面弯曲成圆柱面,射线源和探测器位于圆柱的轴上,相同波长的

X 射线经晶体衍射后都聚焦到一点。

4.2 Johann-Johansson 衍射聚焦结构

Johann 弯晶谱仪于 1931 年由 Johann^[58] 提出,是较早利用弯曲晶体元件的衍射聚焦特性来提高衍射射线强度的 X 射线晶体谱仪,其克服了 X 射线源较弱时平面晶体谱仪诊断能力不足的缺点,典型结构如图 5(a)所示。

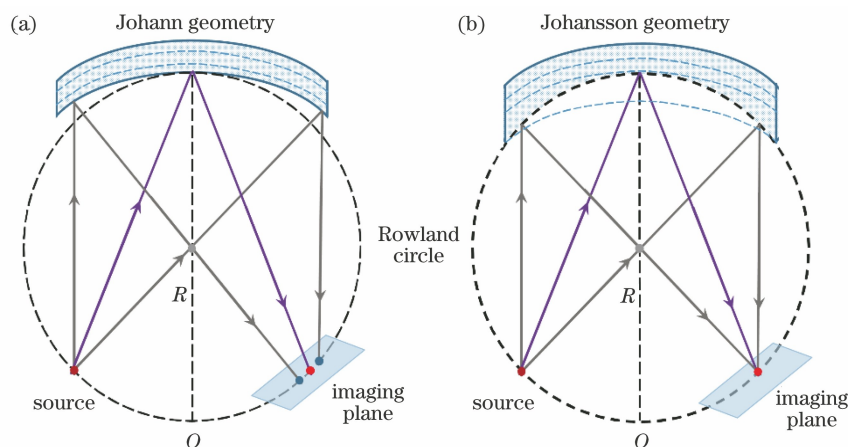


图 5 典型弯曲聚焦型 X 射线晶体谱仪结构。(a) Johann 结构;(b) Johansson 结构

Fig. 5 Structure of typical bending focusing X-ray crystal spectrometer. (a) Johann spectrometer; (b) Johansson spectrometer

在 Johann 结构中,晶体呈圆柱面弯曲,曲率半径为 R ,聚焦罗兰圆半径为 $R/2$ 。在子午面上,罗兰圆上射线源发出的不同波长 X 射线聚焦于罗兰圆上一点,当探测器与罗兰圆相切时,能够得到高分辨光谱。但由于晶体面是一维圆柱弯曲,Johann 结构只在子午面聚焦,而在弧矢面发散,且 Johann 结构在子午面上也并不是完全聚焦的,理论上只有入射至子午面上晶体中心位置时 X 射线完全聚焦,焦点位置与射线源位置对称分布在罗兰圆上,晶面其他位置的射线聚焦误差决定了谱仪的光谱分辨能力^[62]。对于给定波长 λ 的 X 射线,相应的谱线展宽量^[63-64]为

$$\Delta\lambda_m = \frac{L_a^2 \lambda}{8R^2 \tan^2 \theta}, \quad (14)$$

式中: L_a 为晶体孔径。衍射射线在垂直于子午面方向上(弧矢面)发散所导致的附加展宽量为

$$\Delta\lambda_s = \frac{h^2 \lambda}{8R^2 \sin^2 \theta}, \quad (15)$$

式中: h 为晶体高度。根据式(14)、(15),增大晶体曲率半径和 Bragg 角能够有效减小 Johann 聚焦误差带来的谱线展宽,对于小尺寸晶体,该结构依然能够满足大多数光谱诊断要求。

Johansson 谱仪结构是在 Johann 谱仪结构上

改进的,如图 5(b)所示,结构的主要区别在于晶面弯曲和罗兰圆的切合位置关系。晶体首先以曲率半径 R 弯曲,然后研磨成半径为 $R/2$ 凹面,衍射面与罗兰圆弯曲重合,因此罗兰圆上射线源发出的 X 射线在晶体表面均满足 Bragg 衍射条件。与 Johann 结构相比,Johansson 谱仪结构的主要优点在于提高了射线收集效率,尽可能消除了晶体边缘位置像差;缺点是对晶体加工工艺要求较高,弧矢面上的 X 射线仍然发散,引起的谱线展宽仍然由式(15)决定。

Johann/Johansson 聚焦结构是目前应用较为广泛的 X 射线单晶谱仪结构,尽管实际谱仪诊断系统仍然具有一定像差,但由于晶体面型便于制备,谱仪系统结构简单灵活,目前仍然是 X 射线单晶体谱仪的主要结构。在 Johann/Johansson 谱仪布局基础上,科研人员通过设计不同面型衍射晶体元件,如球面晶体、超环面晶体等,可以实现不同物理诊断需求。

4.3 基于 Johann/Johansson 结构的 X 射线晶体谱仪应用

4.3.1 球面晶体谱仪

Johansson 谱仪结构最典型的晶体元件是球面衍射晶体元件,对 Johann 谱仪结构的另一个重要改进是用球面弯晶替代圆柱弯晶^[65],进而使得 X 射线在子午面和弧矢面方向上同时聚焦。在罗兰圆所在

平面即子午平面,射线按 Johann 结构实现衍射聚焦,而在垂直罗兰圆平面的弧矢面,球面弯晶将 X 射线聚焦在此平面焦点 I_s 处。球面弯晶在子午面上可探测光谱信息,而在弧矢面上可得到射线源空间信息。如图 6 球面弯曲晶体聚焦原理图所示,子午面上 X 射线在晶体表面的衍射与在罗兰圆上一点的理想衍射存在一定的聚焦像差。弧矢面上 X 射线的衍射聚焦是基于圆柱对称衍射聚焦原理的,(圆柱)旋转对称轴在射线源与弧矢面焦点的连线上。其中 f_m 和 f_s 分别为射线源在子午面和弧矢

面上的衍射焦距($f_m=R \sin \theta / 2, f_s=R / 2 \sin \theta$), p 为成像物体到晶体中心的距离。值得注意的是, I_m 为子午面光谱检测的最佳位置,而弧矢面上,球面晶体对 X 射线的衍射聚焦作用相当于凹面镜。因此,晶体可以将 X 射线聚焦在平面的焦点 I_s 上。球面晶体衍射聚焦具有以下物像关系^[66]:

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{f_m} = \frac{2}{R \sin \theta}, \quad (16)$$

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{f_s} = \frac{2 \sin \theta}{R}。 \quad (17)$$

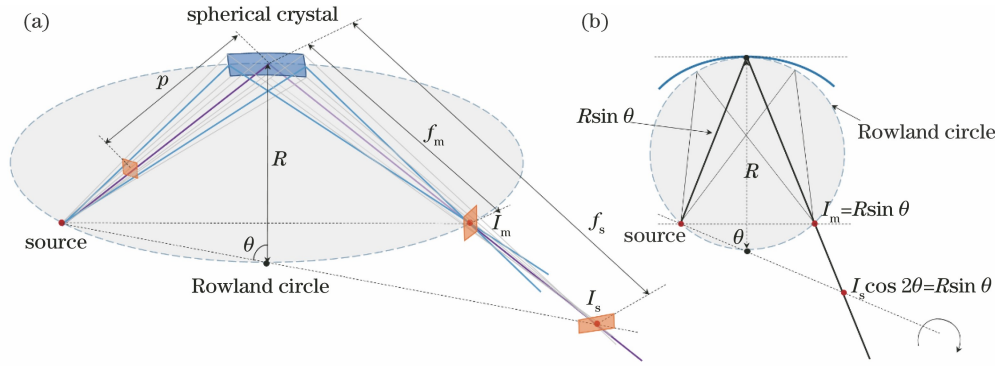


图 6 球面弯曲晶体光路图。(a)子午面/弧矢面衍射光路;(b)子午面/弧矢面焦距关系
Fig. 6 Optical path of spherical curved crystal. (a) Diffraction light path along meridional/sagittal plane;
(b) focus distance of meridional/sagittal plane

当把一物体置于射线源到球面晶体的光路上时,在探测器一侧距晶体中心某位置 b_1 处可得到物体的二维图像。对成像光路进行分析,可求出探测器上接收到的物像在子午面和弧矢面的放大比^[67]分别为

$$M_m = \frac{b_1 - 1}{p - a} \cdot \frac{p}{q}, \quad (18)$$

$$M_s = \frac{q' - b_1}{p - a} \cdot \frac{p}{q'}, \quad (19)$$

式中: a 为射线源到晶体中心距离; q 为晶体到子午面焦点的距离; q' 为晶体到弧矢面焦点的距离。

在球面弯曲晶体衍射几何结构中,可以通过减小 Bragg 角获得较大的放大倍率。当 Bragg 角确定时,则可通过改变物像距比值,即在保证射线源到晶体距离不变的情况下减小被照物体到射线源的距离,来提高图像的放大倍率。对于球面弯晶衍射而言,由于子午面和弧矢面上的焦点位置不重合,应用球面弯晶进行自发光成像时,会存在较大的像差。两个焦线的距离随 Bragg 角的减小而增大,因此应用球面弯晶进行自发光成像时 Bragg 角需要接近 90° ,这在一定程度上限制了成像能量范围和晶体元件的选择范围。

芬兰 Helsinki 大学 Honkanen 等^[68]采用球面弯曲晶体建立了具有多种诊断模式的低成本 Johann 型 X 射线晶体谱仪,如图 7(a)所示。该谱仪可测量由常规实验室 X 射线管发出的低强度 X 射线信号,是专门为 $4 \sim 20$ keV 范围内的 X 射线吸收近边结构分析(XANES)和扩展 X 射线吸收谱精细结构分析(EXAFS)所研究设计的。利用欧洲同步辐射装置(ESRF)晶体谱仪实验室提供的球面晶体谱仪(SBCA,弯曲半径为 0.5 m,表面直径为 100 mm)对 10 keV X 射线进行探测,得到的能量分辨率为 $1 \sim 5$ eV($E/\Delta E \approx 4000$)。图 7(b)为通过该 Johann 型晶体谱仪得到的假单胞菌中累积硒元素的 K 边缘谱与参考光谱。该谱仪结构简单,方便研究人员根据实验环境改变谱仪摆放位置,可以应用于不同诊断需求的实验室 X 射线谱诊断测试。

美国 Washington 大学的 Jahrman 等^[69-70]对用于 XES/XAFS 诊断的球面弯晶元件制备工艺进行了创新研究。与将晶体薄片粘和到玻璃底座上的传统加工方法不同,他们的方法采用了真空气压法将晶体薄片形状保持在提供晶体面形轮廓的模具上,不需要传统的高精度、高成本的晶体薄片打磨工艺。进一步对真空成型 Si(711)球面晶体元件进行了聚

焦成像实验验证,与传统制备方法加工的 Si(551) 晶体球面弯晶元件(SBCA)相比,真空成型球面弯

晶元件(VF-BCA)在弧矢面方向也展现了相对更好的聚焦效果,如图 8 所示。

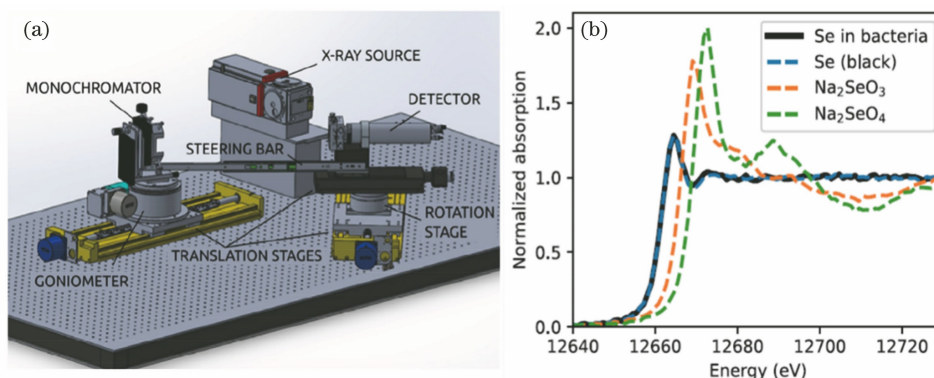


图 7 球面弯晶 Johann 型晶体谱仪^[68]。(a)结构全景图;(b)假单胞菌中累积硒元素的 K 边缘谱与参考光谱
Fig. 7 Johann spectrometer with spherical bent crystal^[68]. (a) Schematic of spectrometer;
(b) K-edge spectra and reference spectrum of selenium accumulation in pseudomonas

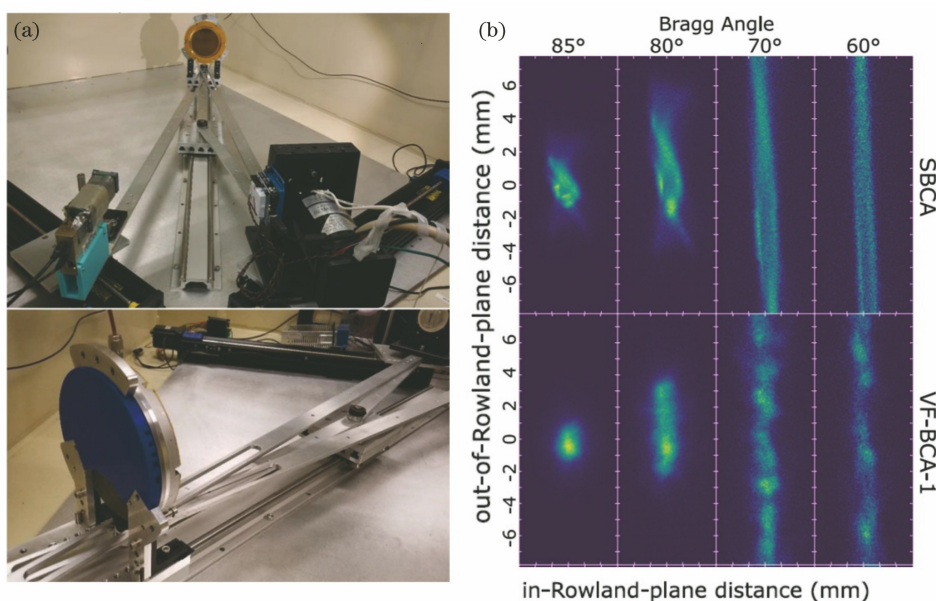


图 8 真空成型球面弯晶成像谱仪^[70]。(a)实验装置图;(b) SBCA & VF-BCA 聚焦成像对比

Fig. 8 Vacuum-formed bent crystal analyzer^[70]. (a) Experimental setup; (b) focus imaging contrast of SBCA & VF-BCA

2019 年同济大学忻秋琪等^[71]提出一种满足高集光效率单色化成像诊断需求的四通道球面弯晶成像系统。将 Ge(400), $2d = 2.828 \text{ \AA}$, $R = 250 \text{ mm}$ 的球面弯晶按照“圆锥体”进行排布,利用 Ti 靶 ($K_{\alpha 1} 4.51 \text{ keV}$) X 射线源进行网格背光成像,获得了 $15 \mu\text{m}$ 的空间分辨率。2021 年劳伦斯利弗莫尔国家实验室 Hell 等^[72]研制出一种基于二阶衍射的 KAP 球面弯晶谱仪。球面半径为 107.3 cm , $2d = 26.632 \text{ \AA}$, 实验并展示了在 EBIT 装置上对 592.9 eV 和 1210.9 eV 的一阶 N Ly β 和二阶 Ne Ly β 谱线的测量结果,二阶光谱显示出比一阶光谱更高的光谱分辨率,二阶 Ne Ly β 谱线的半峰全宽

(FWHM) 为 0.52 eV , $E/\Delta E \approx 2350$, 实验结果证明了球面弯晶谱仪高阶谱线的光谱分辨率性能。

4.3.2 超环面晶体谱仪

对于球面弯晶衍射而言,由于子午面和弧矢面上的成像焦点不在同一位置,为了尽可能地减小成像像差,子午面和弧矢面聚焦成像位置必须近似相等,此时晶体衍射的 Bragg 角接近 90° 。为了解决球面晶体在 X 射线衍射成像系统中的不足,在球面弯晶结构基础上发展了超环面结构晶体元件^[73]。超环面弯晶成像原理如图 9 所示,与球面弯晶结构的不同之处在于,超环面弯晶结构在子午面和弧矢面上拥有不同的曲率半径,其中子午面和弧矢面半径

分别为 R_m 和 R_s 。因此基于球面弯晶结构成像原理,超环面在子午面和弧矢面的成像公式为

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{f_m} = \frac{2}{R_m \sin \theta}, \quad (20)$$

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{f_s} = \frac{2 \sin \theta}{R_s}. \quad (21)$$

超环面弯晶弧矢和子午方向的曲率半径满足关系 $\sin^2 \theta = R_s / R_m$ 。因此超环面晶体弧矢面及子午面曲率须保持固定比值,该比值只与 Bragg 角有关,

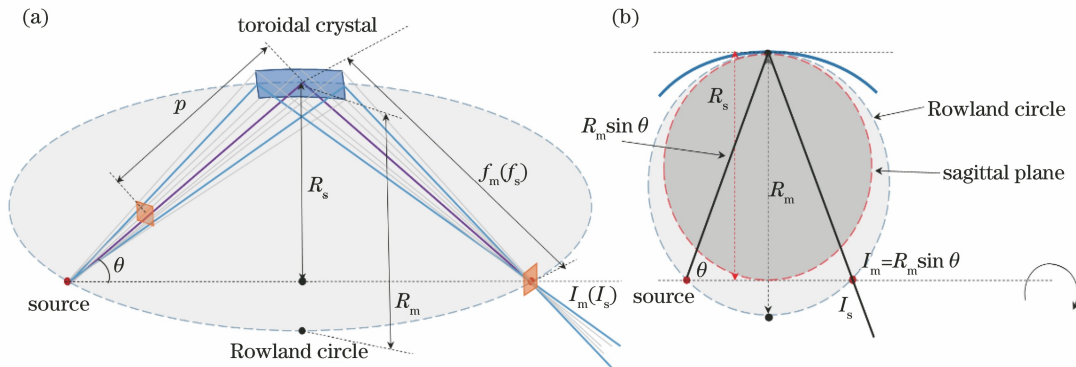


图 9 超环面晶体聚焦原理图。(a)子午面/弧矢面衍射光路;(b)子午面/弧矢面焦距关系
Fig. 9 Focusing principle of toroidal crystal. (a) Diffractive light path along meridional/sagittal plane;
(b) focus distance of meridional/sagittal plane

2015 年 Schollmeier 等^[74] 针对球面/超环面结构晶体元件构建了用于自发光、背光晶体衍射聚焦成像系统的射线光学像差计算理论,并针对超环面结构,在不考虑晶体自身缺陷(例如晶体表面或曲率半径局部变化)的前提下提出了超环面晶体谱仪成像分辨率表达式^[75],

$$\sigma = L_a \left(\frac{M+1}{M} \right) (1 - \sin \theta). \quad (22)$$

根据式(22)可知,空间分辨率随着 Bragg 角的减小而迅速下降,并且与晶体孔径 L_a 成正比。在背光晶体衍射实验中,成像物体作为原点, L_a 取决于射线源在晶体上的投影尺寸,如果直径 Δs 的源位于距离晶体 $R \sin \theta$ 处的罗兰圆上,则 $L_a = L_{BL}$, 其中

$$L_{BL} = \Delta s \frac{p}{R \sin \theta - p}, \quad (23)$$

可以看出,当射线源尺寸约为 $200 \sim 400 \mu\text{m}$, 远小于 L_a 时,在罗兰圆处或附近的背光晶体衍射系统在参数相同的情况下比自发射成像系统具有更高的空间分辨率。

2021 年姚童等^[76] 采用 α -quartz 晶体 ($2d = 2.749 \text{ \AA}$) 设计制备了超环面衍射聚焦成像晶体谱仪,如图 10 所示,通过动力学衍射分层近似理论研

究分析了晶体元件衍射效率,利用特征峰能量为 4.75 keV 的 Ti 靶激光装置,完成了 X 射线背光成像实验,其中超环面石英晶体的子午面和弧矢面半径分别为 295.6 mm 和 268.5 mm ,成像空间分辨率为 $10 \mu\text{m}$,该实验验证了超环面晶体在背光成像条件下的分辨率性能。

2021 年, Jiang 等^[77] 针对激光等离子体诊断需求设计搭建了一种新型四通道超环面晶体单色成像系统,如图 11 所示。利用该成像系统对 Ti 元素 K_{α} 线进行单色成像,四个通道成像器中心视场(FOV)分辨率分别可以达到 $9.2 \mu\text{m}$ 、 $5.5 \mu\text{m}$ 、 $7.5 \mu\text{m}$ 和 $4.0 \mu\text{m}$,成像通道能获得高强度成像结果并保持能谱一致性,根据理论计算,超环面晶体的光谱接受度约为 32 eV ,FOV 超过 4.5 mm 。

4.4 von Hamos 衍射聚焦结构及应用

von Hamos 衍射聚焦结构采用圆柱形弯曲晶体,射线源和探测器均位于圆柱对称轴上,标准结构如图 12 所示^[78]。其子午面射线聚焦效果与平面晶体类似,不同波长 X 射线满足 Bragg 条件,沿晶体长度方向在晶体不同位置发生衍射;在弧矢面, von Hamos 结构通过很大的接收角将单一波长的 X 射线聚焦到对称轴上。谱仪光谱探测范围取决于 Bragg 角和晶体长度,因此在晶体长度和探测器足

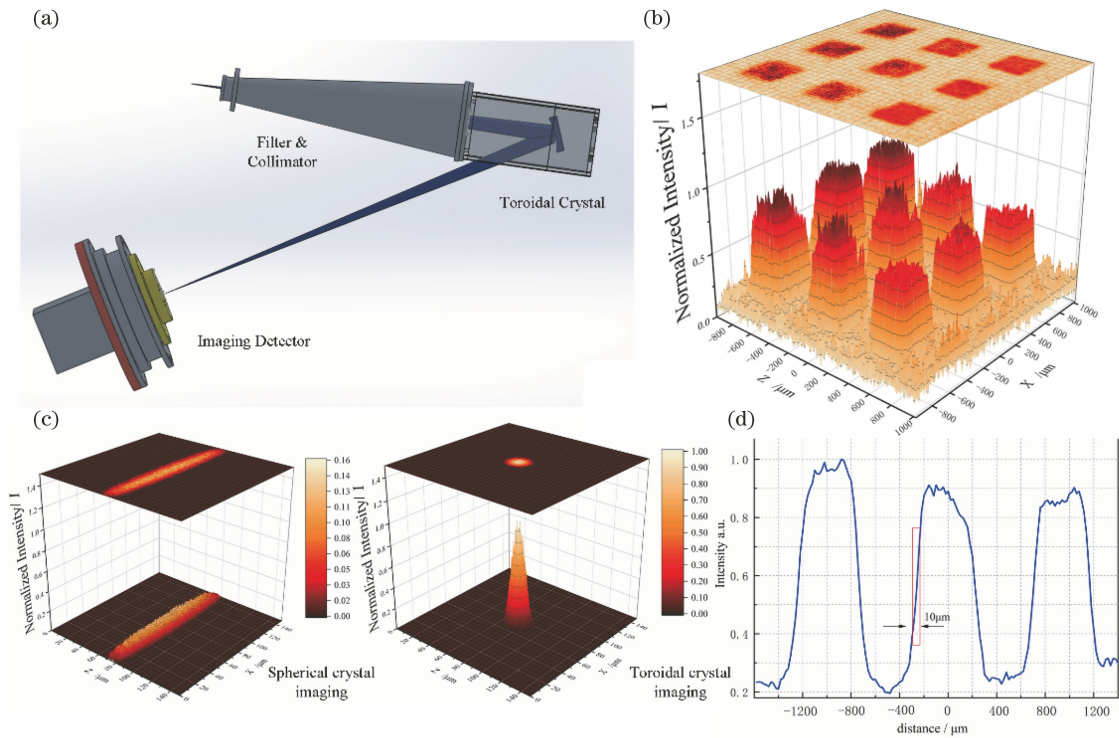


图 10 超环面晶体谱仪^[76]。(a) 谱仪装置图；(b) 栅格成像分布；(c) 超环面晶体与球面弯晶对比；(d) 成像分辨率
 Fig. 10 Toroidal spectrometer^[76]. (a) Illustration of spectrometer; (b) grid imaging distribution; (c) comparison between toroidal crystal and spherical curved crystal; (d) imaging resolution

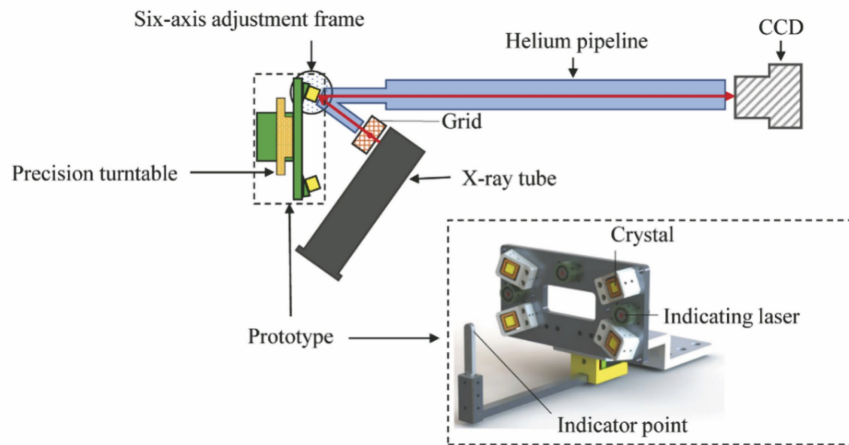


图 11 四通道超环面弯曲晶体谱仪^[77]

Fig. 11 Four-channel toroidal curved crystal spectrometer^[77]

够大时,该结构适用于探测宽谱带 X 射线。von Hamos 谱仪与平晶谱仪的收集效率之比为 $f = R\vartheta / a_s$, 其中 ϑ 为晶体角孔径, R 为晶体弯曲半径, a_s 为光源尺寸。对于光源尺寸为 $10 \sim 100 \mu\text{m}$ 的激光等离子体, 当晶体弯曲半径为 10 mm , 角孔径为 1 rad 时, 该比值可达 $100 \sim 1000$ ^[79-80], 因此 von Hamos 谱仪尤为适用于研究低强度、小尺寸源 X 射线谱诊断实验。与 Johann 和 Johansson 结构晶体谱仪相比, von Hamos 结构在整个宽谱带上均具有高光子

收集效率。但当射线源为线源时, von Hamos 结构具有明显成像缺陷, 单能射线源经圆柱弯晶聚焦后的像为抛物线, 抛物线形状由晶体的角孔径决定, 晶体宽度不足的情况下会产生图像展宽的像散现象, 其不同方向的展宽量^[61]为

$$\Delta x_1 = \frac{2y^2}{R^2} \cot \theta \left(1 + \frac{1}{2 \cot^2 \theta} \right) \sin^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad (24)$$

$$\Delta y_1 = -\frac{2y^2}{R^2} \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (25)$$

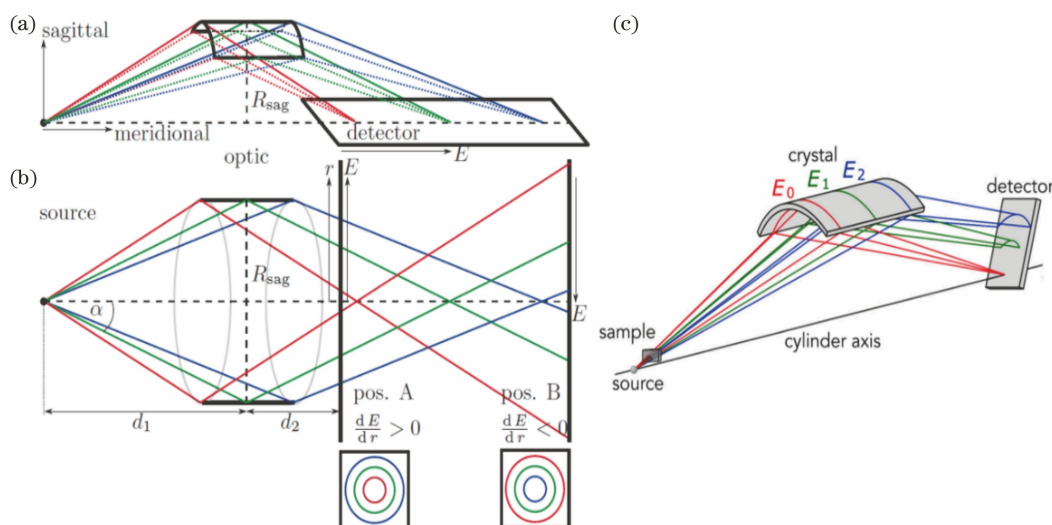


图 12 不同 von Hamos 弯晶谱仪结构^[78]。(a)标准 von Hamos 聚焦结构；(b) XES 光谱仪 von Hamos 聚焦结构；(c) XAFS 光谱仪 von Hamos 聚焦结构

Fig. 12 Different von Hamos curved crystal spectrometers^[78]. (a) Standard von Hamos focusing structure; (b) von Hamos focusing structure in XES spectrometer; (c) von Hamos focusing structure in XAFS spectrometer

根据所得展宽量,也能得出空间分辨率,对于近似点源(如激光等离子体),当 $y = 100 \mu\text{m}$, $R = 20 \text{ mm}$, $\vartheta = 1 \text{ rad}$, $\theta = 30^\circ$ 时, $x_1 < 1 \mu\text{m}$, $y_1 < 1 \mu\text{m}$ 。因此对于激光等离子体, von Hamos 结构能够得到较高的空间分辨率。 von Hamos 谱仪的光谱分辨能力主要受限于晶体摇摆曲线半峰全宽 δ_θ 、光源尺寸 a_s 和像散引起的色散方向光谱展宽 Δx_1 , 光谱展宽较小,因此在大多数情况下光谱分辨能力主要由射线源尺寸决定。对波长为 λ 的 X 射线,光源尺寸导致的子午面光谱展宽为

$$\Delta\lambda = \frac{a_s \sin(2\theta)}{4R} \lambda. \quad (26)$$

von Hamos 晶体谱仪的对称环状设计适合真空或 He 气真空环境下测量较轻元素和稀土元素的 XES 谱。2019 年斯坦福直线加速器中心(SLAC)的 Abraham 等^[81]研制出一种诊断 sulfur K_α 线(2.3 keV)的高通量高能量分辨率 von Hamos 型 X 射线晶体谱仪,并将其应用于 X 射线自由电子激光器和同步加速器的 X 射线诊断。晶体材料选用具有较大晶面间距的 $\text{LiNbO}_3(01\bar{4})$ 晶体($2d \approx 5.47 \text{ \AA}$),与传统 Johansson 晶体谱仪相比, von Hamos 晶体谱仪 X 射线强度增加了约 15 倍,如图 13 所示,能量分辨率约为 0.3 eV($E/\Delta E \approx 8000$)。

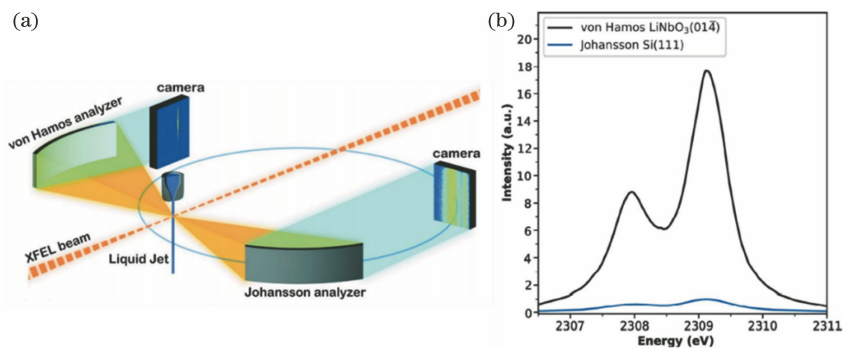


图 13 von Hamos $\text{LiNbO}_3(01\bar{4})$ 晶体谱仪与 Johansson $\text{Si}(111)$ 晶体谱仪对比实验^[81]。(a)谱仪结构；(b)测量谱线对比

Fig. 13 Comparison between von Hamos $\text{LiNbO}_3(01\bar{4})$ crystal spectrometer and Johansson $\text{Si}(111)$ crystal spectrometer^[81]. (a) Schematic of spectrometer; (b) comparison of the sulfur K_α XES

2020 年帕德博恩大学 Kalinko 等^[82]研制的 von Hamos 型硬 X 射线晶体谱仪采用 16 块尺寸为

100 mm × 40 mm 的晶体组成半径为 500 mm 的圆柱弯晶,能量范围达 5 ~ 20 keV,能量分辨率为

0.35~1.00 eV。目前使用 Si(444)晶体构建的谱仪在 PETRA III 同步加速器辐射设施的满足 Bragg 角为 80°的光束线 P64 的 X 射线能量分辨率为 0.35 eV,如图 14 所示。2020 年浦项加速器实验室 Rani 等^[83]研制出一种基于布拉格原理的新型分段 von Hamos 型圆柱晶体谱仪,该谱仪中 4 个不同晶

面间距 Si(111)、Si(110)、Si(100)和 Si(311)的硅片粘在曲率半径为 250 mm/500 mm 的凹型玻璃基板上,如图 15 所示,可测量的 X 射线能量范围为 6.54~11.51 keV。利用该谱仪完成了浦项加速器实验室 1C 光束线(PLS-II)的 XES 分析诊断实验,能量分辨率为 0.5~1.0 eV。

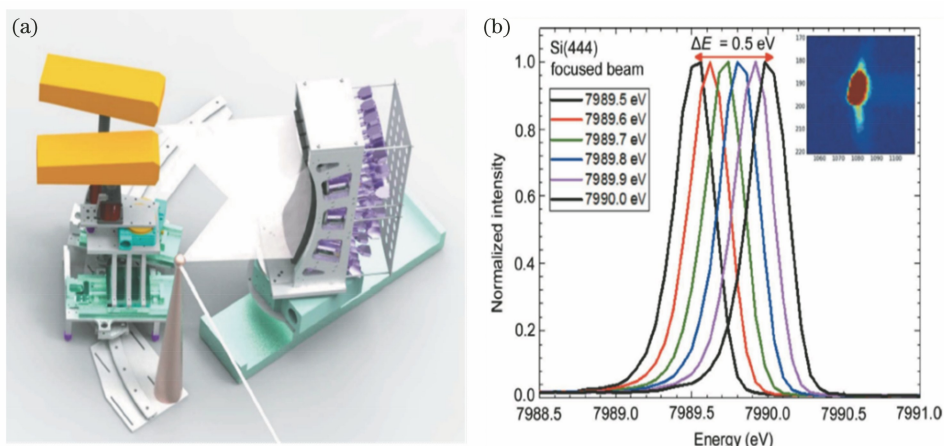


图 14 von Hamos 多晶体集成谱仪^[82]。(a) 16 块 Si(111)晶体谱仪;(b)弹性散射测量谱线结果

Fig. 14 Integrated von Hamos multi-crystal spectrometer^[82]. (a) Spectrometer with sixteen Si(111) crystals; (b) spectra of elastic scattering measurement

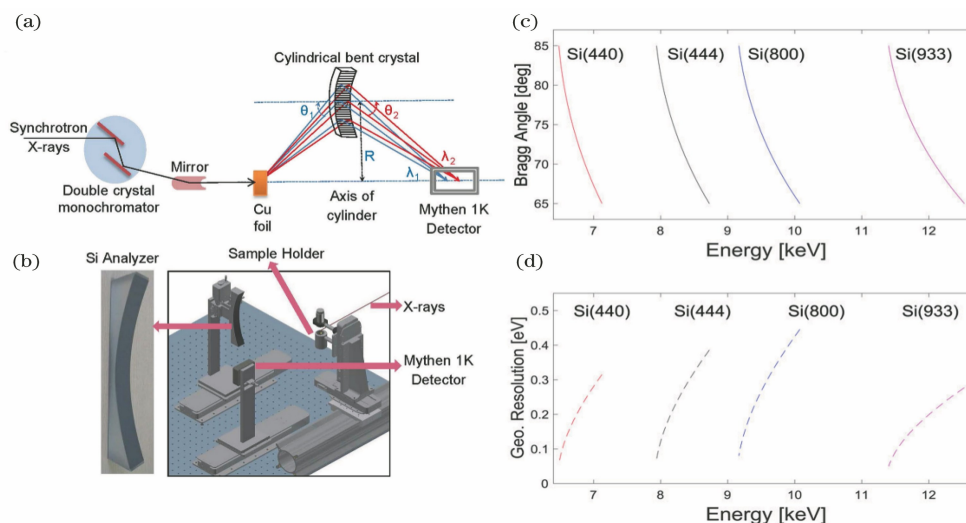


图 15 分段 von Hamos 型晶体谱仪及相应性能参数^[83]。(a)原理示意图;(b)装置示意图;

(c)测试 Bragg 角参数;(d)测得的谱线分辨率

Fig. 15 Segmented von Hamos spectrometer and the spectrum specifications^[83]. (a) Diagram of principle; (b) diagram of setup; (c) measured Bragg angle; (d) measured resolution

2021 年法国索邦大学 Ismail 等^[84]研制了一个基于热处理热解石墨(HAPG)晶体的 von Hamos 型 X 射线晶体谱仪。晶体尺寸为 25 mm × 110 mm, $2d = 6.708 \text{ \AA}$ (002), 圆柱半径 $R = 500 \text{ mm}$ 。该谱仪可对 2.0~5.4 keV(Bragg 角为 20°~67°)范围内的 X 射线进行测量。验证实验在

SOLEIL 同步加速器装置进行(能量窗口为 75 eV, Bragg 角为 38°),诊断获得光谱分辨率为 1.47 eV ($E/\Delta E$ 达 4000)。

von Hamos 衍射聚焦结构具有较高的探测效率,目前高能物理诊断应用都普遍采用多块晶体拼接的方式构建 von Hamos 结构谱仪,关键原因是满

足多功能诊断的需求,力求覆盖更宽的谱线诊断范围;同时,分块小面积晶体元件的加工使得谱仪制备难度大幅度降低而系统更具灵活性。此外,采用 von Hamos 柱面聚焦结构的谱仪不适用于耦合条纹相机的时间分辨诊断实验,其原因在于条纹相机尺寸较大,为避免与其他诊断设备发生干扰,通常要求探测器平面与圆柱对称轴相互垂直。

4.5 基于 von Hamos 聚焦结构的谱仪改进及应用

4.5.1 圆锥晶体谱仪

X 射线衍射晶体光谱测量中,尽管 von Hamos 谱仪以高射线收集效率而受到广泛应用,但在部分对诊断探测位置有严格要求的诊断实验中,如耦合条纹相机时间分辨诊断实验,通常要求探测平面与圆柱对称轴相互垂直。尽管 von Hamos 谱仪垂直放置于探测器时也能够获取光谱并且易于操作调节,但是该情况下的光谱只在圆柱对称轴上一点完全聚焦,而垂直方向上远离对称轴位置的光谱则表现为同心的圆弧状,且在空间方向上展宽,导致光谱空间分辨率和谱线亮度同时降低^[78]。针对上述问题,Hall^[85]在 von Hamos 结构的基础上,提出了圆锥聚焦结构,该结构可在垂直于对称轴方向上获取空间聚焦的光谱图像。

如图 16 所示,晶体表面为圆锥面的一部分,衍射分光发生在圆锥弯晶的母线方向,而圆锥晶体将衍射射线聚焦到过圆锥顶点的 y 轴上。探测器平面过圆锥顶点并垂直于 x 轴,位于 $y-z$ 方向,像面到光源距离为 L 。圆锥谱仪可以视为局部偏轴的圆柱谱仪,且越靠近成像面,圆柱半径越小。假设 (x_s, y_s, z_s) 为光源位置,中心光轴所在平面上入射 X 射线与晶体的交点及与成像面交点坐标分别为 (x_c, y_c, z_c) 和 (x_i, y_i, z_i) ,在 $y-z$ 平面上晶体的弯曲半径为

$$R(x_c) = -2 \frac{y_c}{L} (L - x_c)。 \quad (27)$$

对于给定的 Bragg 角条件,在近轴近似条件下,圆锥晶体衍射聚焦的 X 射线的色散率 D 为

$$D = \frac{dy_i}{d\lambda} = \frac{nL}{d} \left[1 + \left(\frac{y_i + 2y_c}{L} \right)^2 \right]^{3/2}。 \quad (28)$$

由于偏轴圆柱的半径与圆锥局部半径并不相等,因此对于离轴 X 射线,近轴近似会导致两个问题:同一波长 X 射线在成像面上存在散焦现象,影响光谱分辨能力;由于球差影响存在的成像横向展宽,影响空间聚焦性能。但对于给定的光谱范围,在宽度尺寸有限条件下,近轴近似的影响可以忽

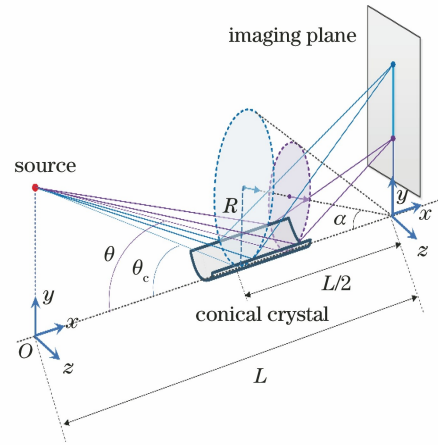


图 16 圆锥晶体子午面上的 X 射线色散
Fig. 16 X-ray dispersion on the meridional plane of conical crystal

略^[85]。当晶体宽度 z_c 增加时,光谱空间方向展宽随之增大,对于位于原点位置的单能点光源,射线追迹模拟表明,当 $z_c/L > 0.025$ 时,空间分辨率迅速降低,而光谱分辨率几乎不受影响^[86]。在实际应用中,需要综合考虑光源到探测器的距离 L 和晶体宽度 z_c 对最终成像结果的影响^[87]。

对 Z 箍缩等离子体的诊断,要求晶体与源距离足够远,以避免晶体被破坏,针对不同的诊断需求,可以灵活调整锥面晶体结构谱仪的相对位置。针对 Z 箍缩等离子体辐射测量的谱仪结构要求,Pikuz 等^[88]曾提出一种超高亮度圆锥谱仪结构,该结构中射线源和探测面都位于圆锥母线(对称轴)上。对于 Z 箍缩线光源,在探测平面能够获得各衍射聚焦能点的二维分布,使得谱仪具有空间分辨能力。其优点在于接收立体角大,结构简单,在晶体远离光源的情况下仍然能够得到高亮度光谱,其聚焦线长度相比同样大小传统锥面晶体谱仪减少了 1/2,而衍射聚焦谱平均亮度提高了 5~6 倍^[89]。2020 年 Robledo 等^[90]研制出一种分段圆锥面型的高分辨率晶体谱仪,该谱仪结构紧凑,圆锥晶体到探测器的距离为 146 mm,采用 Si(220)圆锥晶体对 Mn $K_{\alpha 1}$ (5897 eV)谱线测量的能量分辨率达 8 eV,可测量的 X 射线能量范围为 5.3~7.0 keV,如图 17 所示。

4.5.2 变曲率锥面晶体谱仪

尽管 Hall 提出的锥面结构能够减小成像误差,不过由于其参与成像的射线在理论上不具有旋转对称性,因此仍然不是无像差的完美成像。为了消除传统锥面晶体谱仪存在的像差缺陷^[91],需要进一步完善锥面晶体谱仪结构。Morishita 等^[92]、Bitter 等^[93]、Shi 等^[94]在传统圆锥晶体基础上提出具有连

续变曲率锥面的多能点衍射聚焦晶体结构,该类变曲率晶体结构谱仪具有光谱范围宽、聚焦能力强、光谱分辨率高的特点。在晶体衍射成像结构设计中,

由于能够确保成像射线的旋转对称性,在原理上可消除传统圆锥晶体 X 射线衍射成像像差。

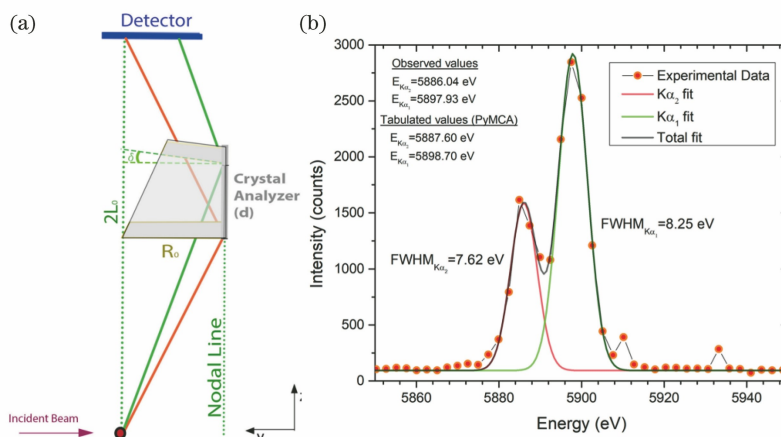


图 17 分段圆锥晶体谱仪^[90]。(a)结构示意图;(b)测得的 Mn 样品 K_α 谱线数据

Fig. 17 Segmented conical analyzer^[90]. (a) Schematic of structure; (b) measured Mn K_α lines

变曲率锥面晶体结构^[94]如图 18 所示,入射射线与衍射面的夹角为 Bragg 角 θ_B 。一个特定波长(能量)入射射线能够被一个对应的微小高度 Δt 的锥面晶体衍射聚焦至成像面 B 点,以此类推可以看作有若干微圆锥面组成的一个变曲率面,变曲率面的内表面就是设计需要的晶体衍射面,相应地也有

若干衍射聚焦点位于探测器平面聚焦线上,即可以实现点源发散的射线在与晶体表面垂直的平面上的衍射聚焦。这一面型结构设计使得成像面具有较高衍射聚焦强度分布的同时所有参与成像的射线在理论上都具有旋转对称性^[93]。

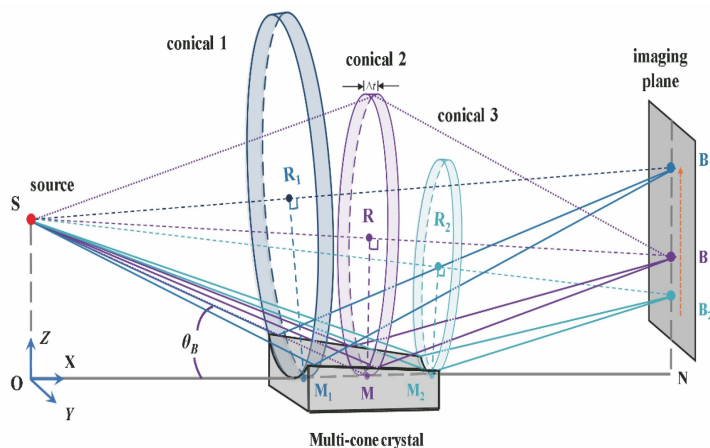


图 18 连续变曲率锥面晶体谱仪衍射聚焦结构^[94]

Fig. 18 Diffraction focusing structure of conical crystal spectrometer with continuous variable curvature^[94]

在制备过程中,采用不同的加工工艺使变曲率锥面晶体谱仪中的晶体弯曲,这一过程会由于晶体内部应力问题导致一定的晶面扭曲,进一步影响到相应的晶体谱仪能量分辨率。Morishita 等^[92]通过热塑性变形工艺^[95]制备了所需的晶体形状。他们提出了一种对连续变曲率表面进行样条积分,采用具有积分表面形状的上下模具压制晶体的加工方法,所制备变锥面晶体具有 28~50 mm 较小曲率半

径,如图 19 所示。由于晶体应变造成了晶面分布的不均匀性,采用实验室 X 射线源测量所得的 X 射线荧光谱能量分辨率受到影响,通过谱线去卷积处理,获得了 9~13 eV 的能量分辨率 (Ni $K_{\alpha 1}$ 9.1 eV, Cu $K_{\alpha 1}$ 11.3 eV)。

Shi 等^[96]针对 Ti 靶 4511~4932 eV 特征谱线能量范围诊断需求,设计了用于耦合 X 射线 CMOS 相机的变曲率锥面晶体谱仪,并分析指出了表面误

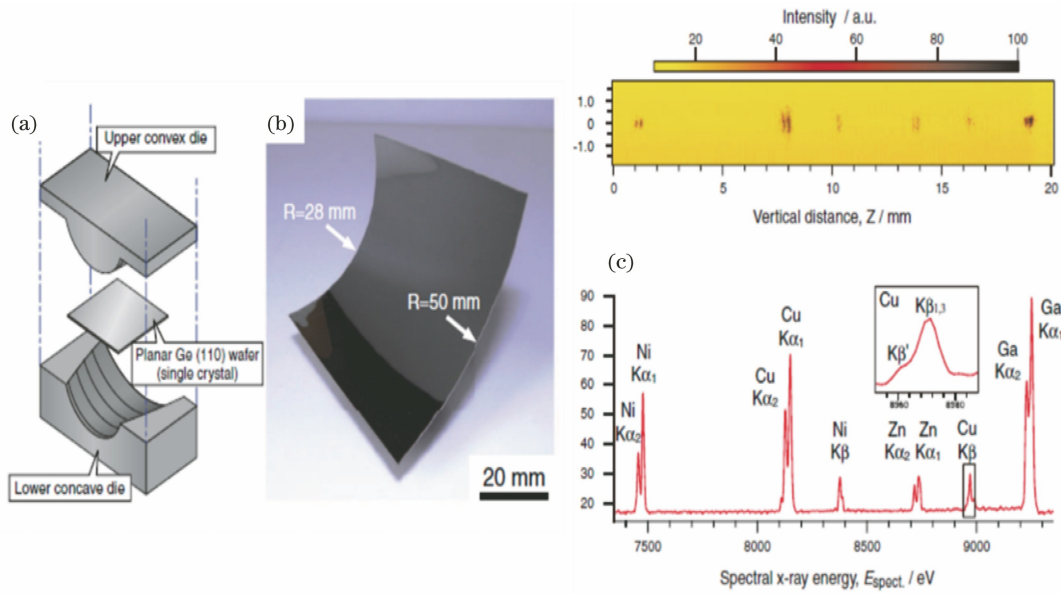


图 19 热塑性法制备变曲率面晶体^[92]。(a)制备示意图;(b)变曲率面 Ge 晶体;(c)获得的 X 射线荧光光谱

Fig. 19 Variable curvature surface crystals prepared by thermoplastic method^[92]. (a) Schematic of fabrication process; (b) Ge crystal with variable curvature surface; (c) acquired XRF data

差对变曲率锥面结构晶体衍射聚焦性能的影响。当曲面沿半径方向下移 Δz 时,在成像面位置将不能得到理想会聚点像,取而代之的是椭圆聚焦分布,且 y 方向的最大偏差为

$$\delta_{\pm y} = \pm 2\Delta z \frac{\cos^2 \alpha \sin \beta}{\sin(\alpha + \beta)}, \quad (29)$$

式中: α 和 β 为相关偏差角度。色散方向 z 最大负方向偏差为 $\delta_{-z} = 2\Delta z$,最大正方向偏差为

$$\Delta_z = 4\Delta z \frac{\cos \alpha \sin \beta}{\sin(\alpha + \beta)} - 2\Delta z. \quad (30)$$

Shi 等^[96] 基于降低表面误差影响的考虑,采用制备高精度玻璃基底并粘贴薄片的方式,选用晶格常数为 6.687 \AA 的 α -quartz(1011)晶体,完成了变曲率锥面衍射聚焦晶体的加工制备,并进一步完成了 Ti 靶的 K_α 射线诊断实验,如图 20 所示。实验获得了 671 的光谱分辨率,且变曲率锥面晶体获得的收光强度为平面晶体收光强度的 157 倍。

4.6 其他类型晶体谱仪结构

除了前述 X 射线弯晶元件,根据不同装置不同时期的 X 射线诊断需求,如射线源尺寸、辐射强度分布特性、物像距参数、射线能量范围及空间分辨率等,科研人员在常用晶体衍射聚焦结构基础上也设计发展了若干如椭球面弯晶^[97-99]、抛物面弯晶^[100]等不同面型结构 X 射线衍射晶体元件。近年来,小型点状光源的谱线测量及成像诊断逐渐成为弯曲晶体谱仪的主要应用研究方向,也有多种新型衍射聚

焦晶体结构被提出。

2021 年普林斯顿大学 Bitter 等^[101] 提出一种具有正弦螺旋线聚焦特性的新型衍射晶体聚焦理论。针对 NIF 装置上 EXAFS 诊断需求,仿真计算了所设计面型的 Ge(400)晶体对 $9.750 \sim 10.750 \text{ keV}$ 能量 X 射线的聚焦效果。结果表明,这种正弦螺旋线面型结构对 Ta- L_3 吸收边附近的扩展 X 射线聚焦分辨率达 $E/\Delta E = 7670$;同时也指出如果点源放置在适当的位置,对于正弦螺旋面型晶体,具有恒定衍射 Bragg 角,这一特性可用于最大化特定能量 X 射线和给定晶体长度条件下的晶体元件衍射聚焦光子通量。

该项目组进一步研究设计了基于可变子午面和弧矢面曲率的正弦螺旋弯曲晶体结构谱仪(variable-radii sinusoidal spiral),并期望对小型点状 X 射线源实现精细光谱诊断^[102]。仿真计算了尺寸为 $60 \text{ mm} \times 30 \text{ mm}$ 的 Si 晶体元件[(422), $2d = 2.2172 \text{ \AA}$,正弦螺旋参数 $b_{sp} = 0.6014$ (可变子午面半径 R_{major} 为 $1975 \sim 2633 \text{ mm}$,可变弧矢面半径 r_{minor} 为 $190.2 \sim 203.2 \text{ mm}$)]对 Pb L_3 吸收边 X 射线($12.750 \text{ keV} < E < 13.945 \text{ keV}$)的衍射聚焦谱分辨能力,最终得到能量分辨率为 $3.1 \sim 3.3 \text{ eV}$ 。这类可变曲率正弦螺旋 X 射线谱仪经过了多次理论改进,能够同时减少像差,提高谱仪能量分辨率,降低光源尺寸展宽带来的影响,能够明显提升光通量,是一类专门用于小型点状光源谱线测量的有效 X 射线衍射晶体诊断元件。

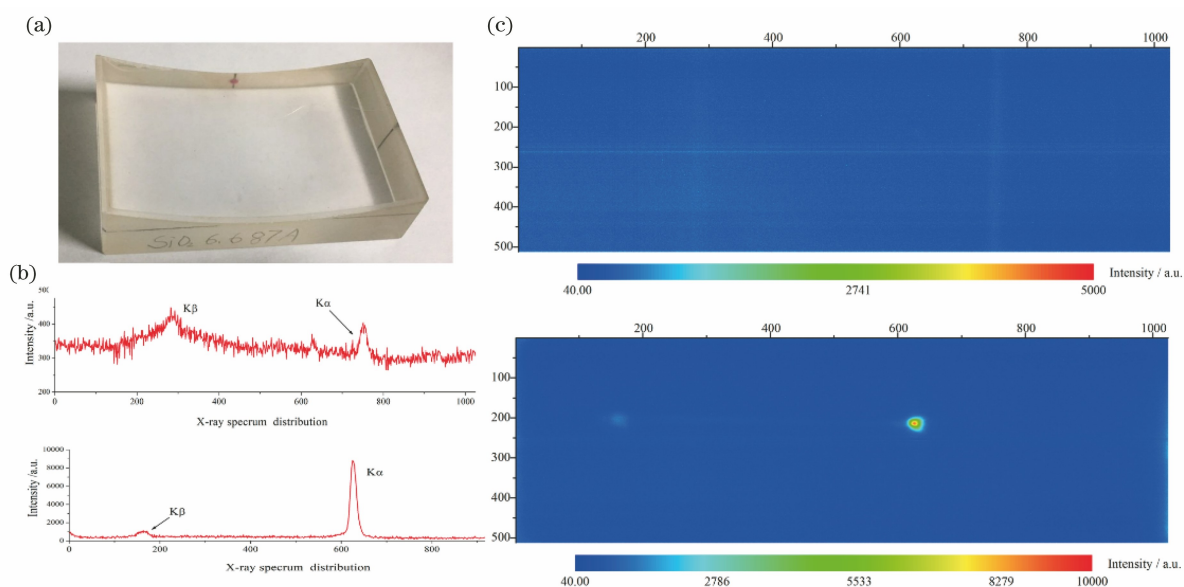


图 20 变曲率锥面晶体及实验性能^[96]。(a)变曲率面 α -quartz 晶体;(b)变曲率锥面晶体与平面晶体的谱线对比;
(c)变曲率锥面晶体与平面晶体聚焦的成像对比

Fig. 20 Schematic of the multi-cone crystal and its performance^[96]. (a) Multi-cone α -quartz crystal; (b) spectrum comparison between multi-cone crystal and plane crystal; (c) focusing performance comparison between multi-cone crystal and plane crystal

5 讨论与结束语

基于晶体衍射的 X 射线光谱测量是大型激光装置、同步辐射装置及实验室领域 X 射线光谱学诊断、XES 和 XAFS 材料分析与结构表征等的重要方法和技术手段,各种极端状态物质辐射现象都需要通过高分辨率 X 射线光谱进行诊断,且通常都有对应的 X 射线晶体谱仪能够满足诊断需求。X 射线衍射晶体谱仪的研究发展方向一方面是对晶体中 X 射线衍射机理及过程的准确计算描述;另一方面在于针对不同应用领域越来越高的诊断需求,通过聚焦结构设计实现 X 射线高分辨率诊断。本文简要介绍了以动力学衍射理论为主的晶体衍射效率计算理论及发展趋势,探讨了一系列广泛应用于 X 射线光谱测量的 Bragg 型弯曲晶体衍射谱仪结构,总结了多种聚焦谱仪结构成像关系、光谱分辨率及线色散率等谱仪特性。

目前 X 射线动力学衍射理论仍然是描述晶体元件衍射过程机理、分析衍射效率的主要理论。经典的 Takagi-Taupin 偏微分方程组是晶体材料分析研究领域的普适性理论方程,目前各类仿真计算程序普遍都采用数值计算方法或有限元模型方法。X 射线晶体谱仪作为 X 射线晶体衍射特定应用方向之一,其相关衍射效率理论计算研究一方面可以针

对谱仪诊断应用场景,设定合适入射波或出射波表达式,建立更易求解的 Takagi-Taupin 方程组简化形式及对应的边界条件;另一方面,也可以尝试较为先进的偏微分方程求解方法,如利用基于物理信息的神经网络(PINN)^[103]进行动力学衍射方程的求解。PINN 在训练过程中施加了物理信息约束,不仅尽力遵循训练数据样本的分布规律,而且也遵守偏微分方程描述的物理定律,期望在较少晶体衍射数据样本基础上可以习得更具普适性的动力学衍射模型。本课题组也致力于对基于物理信息神经网络求解 Takagi-Taupin 方程组的研究,开展相关方向的研究将有力地推动晶体衍射仿真技术在 X 射线晶体谱仪诊断过程中的实际应用。

在具有较高衍射效率晶体元件基础上,基于高质量弯曲晶体元件的衍射聚焦方案设计可在保证晶体元件具有高光子收集效率的同时,无需借助光阑狭缝而获得高空间分辨率和光谱分辨率。对等离子体 X 射线谱线诊断而言,同时具备空间-谱线诊断能力的新型面型结构晶体元件的使用,极大地增强了 X 射线晶体谱仪的诊断潜力,例如从时间积分光谱中也可以重建超热电子的时间演化和空间分布。目前,晶体谱仪的相关研究工作主要集中在针对高光子通量、强聚焦效果的新型晶体面型结构的设计与改进。设计新面型结构晶体时,除了考虑子午面衍

射聚焦效果外,还要围绕具有不同子午面和弧矢面曲率半径的面型结构实现改进设计,将有效提升晶体 X 射线衍射聚焦和光谱分辨能力,如前文所述的变曲率连续锥面、变曲率连续正弦螺旋面等新型晶体面型。通过各种晶体面型创新设计,达到扩展谱仪 X 射线诊断能量范围,减小光源尺寸展宽、成像像差对诊断结果的影响的效果。

最后,X 射线衍射晶体谱仪相关研究与多个领域互相交叉^[104-105],在光谱成像、材料分析与结构表征以及其他 X 射线甚至中子探测领域都有深入发展。随着各种新理论、新结构的出现,X 射线衍射晶体谱仪性能必会进一步提升,将有力推动国家大科学装置诊断能力建设迈上新台阶。

参 考 文 献

- [1] 王淦昌,袁之尚. 惯性约束核聚变[M]. 北京: 原子能出版社, 2005.
Wang G C, Yuan Z S. Inertial confinement fusion [M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2005.
- [2] 温树槐,丁永坤. 激光惯性约束聚变诊断学[M]. 北京: 国防工业出版社, 2012.
Wen S H, Ding Y K. Laser inertial confinement fusion diagnostics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012.
- [3] 姚立,蒲昱东,韦敏习,等. 神光Ⅲ原型 X 射线荧光成像原理验证实验[J]. 光学学报, 2020, 40(6): 0634001.
Yao L, Pu Y D, Wei M X, et al. A proof-of-principle experiment demonstrating X-ray fluorescence imaging at the Shenguang-III prototype laser facility[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(6): 0634001.
- [4] 周维民,于明海,张天奎,等. 基于皮秒拍瓦激光的高分辨 X 射线背光照相研究[J]. 中国激光, 2020, 47(5): 0500010.
Zhou W M, Yu M H, Zhang T K, et al. High-resolution X-ray backlight radiography using picosecond petawatt laser [J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(5): 0500010.
- [5] 徐朝银. 同步辐射光学与工程[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2013.
Xu C Y. Optics and engineering of synchrotron radiation [M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2013.
- [6] 李闯,刘孟廷,张增艳,等. 同步辐射聚焦光束能量带宽的检测方法[J]. 光学学报, 2020, 40(19): 1934001.
Li C, Liu M T, Zhang Z Y, et al. Method for energy bandwidth measurement of synchrotron radiation focused beam [J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(19): 1934001.
- [7] Renner O, Rosmej F B. Challenges of X-ray spectroscopy in investigations of matter under extreme conditions [J]. Matter and Radiation at Extremes, 2019, 4(2): 024201.
- [8] Friedrich W, Knipping P, von Laue, et al. Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen[R]. Bayerische Akademie der Wissenschaften/Mathematisch Physikalische Klasse, 1912: 303-322.
- [9] Bragg W L. The diffraction of short electromagnetic waves by crystals[J]. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1913, 17: 43-57.
- [10] 金戈,张臣,黎龙辉,等. Angel 型龙虾眼 X 射线光学器件的研制及性能测试[J]. 光学学报, 2021, 41(6): 0634001.
Jin G, Zhang C, Li L H, et al. Fabrication and performance testing of angel lobster-eye X-ray micro-pore optics[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(6): 0634001.
- [11] 邓婷,刘锋伟,覃蝶,等. X 射线柱面反射镜的非零位干涉测量[J]. 光学学报, 2022, 42(4): 0434001.
Deng T, Liu F W, Qin D, et al. Non-null interferometric test of X-ray cylindrical reflect mirror [J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(4): 0434001.
- [12] Zou Y M, Hutton R, Currell F, et al. Handbook for highly charged ion spectroscopic research[M]. Boston: CRC Press, 2016.
- [13] 江少恩,丁永坤,刘慎业,等. 神光系列装置激光聚变实验与诊断技术研究进展[J]. 物理, 2010, 39(8): 531-542.
Jiang S E, Ding Y K, Liu S Y, et al. Recent inertial confinement fusion experiments and diagnostic techniques on the Shenguang laser facility [J]. Physics, 2010, 39(8): 531-542.
- [14] Ameh E S. A review of basic crystallography and X-ray diffraction applications [J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2019, 105(7/8): 3289-3302.
- [15] Kaganer V M, Petrov I, Samoylova L. X-ray diffraction from strongly bent crystals and spectroscopy of X-ray free-electron laser pulses[J]. Acta Crystallographica. Section A, Foundations and Advances, 2020, 76(1): 55-69.
- [16] Wang F, Jiang S E, Ding Y K, et al. Recent diagnostic developments at the 100 kJ-level laser facility in China [J]. Matter and Radiation at Extremes, 2020, 5(3): 035201.
- [17] 麦振洪. X 射线衍射动力学: 理论与应用[M]. 北

- 京: 科学出版社, 2019.
- Mai Z H. X-ray diffraction dynamics-theory and application[M]. Beijing: Science Press, 2019.
- [18] 潘峰, 王英华, 陈超. X 射线衍射技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 2016.
- Pan F, Wang Y H, Chen C. X-ray diffraction technology[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2016.
- [19] Zolotoyabko E. Basic concepts of X-ray diffraction [M]. Weinheim: Wiley-VCH, 2014.
- [20] Dias D F, Sasaki J M. A study on the limit of application of kinematical theory of X-ray diffraction [J]. Zeitschrift Für Kristallographie-Crystalline Materials, 2020, 235(11): 523-531.
- [21] Powell D R. Review of X-ray crystallography [J]. Journal of Chemical Education, 2016, 93(4): 591-592.
- [22] Darwin C G. The theory of X-ray reflexion. part II [J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1914, 27(160): 675-690.
- [23] 韦敏习. 晶体谱仪定量化的初步实验研究[D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2006.
- Wei M X. Preliminary experimental study on quantification of crystal spectrometer [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2006.
- [24] Prins J A. Die reflexion von röntgenstrahlen an absorbierenden idealen kristallen[J]. Zeitschrift Für Physik, 1930, 63(7/8): 477-493.
- [25] Borie B. The Darwin dynamical theory of X-ray diffraction [J]. Acta Crystallographica, 1967, 23(2): 210-216.
- [26] Ewald P P. Zur begründung der kristalloptik [J]. Annalen Der Physik, 1917, 359(23): 519-556.
- [27] Laue M. Die dynamische theorie der Röntgenstrahlinterferenzen in neuer form[M]//der Naturwissenschaften S. Ergebnisse der exakten naturwissenschaften. Heidelberg: Springer, 1931, 10: 133-158.
- [28] 胡凌飞. 基于几何光学和波动光学的同步辐射光学模拟[D]. 北京: 中国科学院大学, 2015.
- Hu L F. Synchrotron radiation simulation based on geometrical and wave optics [D]. Beijing: Chinese Academy of Sciences, 2015.
- [29] Authier A. Dynamical theory of X-ray diffraction [M]. Oxford: Oxford University Press, 2001.
- [30] Molière G. Quantenmechanische theorie der röntgenstrahlinterferenzen in kristallen I. ableitung und allgemeine diskussion der dynamischen grundgleichungen [J]. Annalen Der Physik, 1939, 427(3): 272-296.
- [31] Kato N. The energy flow of X-rays in an ideally perfect crystal: comparison between theory and experiments [J]. Acta Crystallographica, 1960, 13(4): 349-356.
- [32] White J E. X-ray diffraction by elastically deformed crystals [J]. Journal of Applied Physics, 1950, 21(9): 855-859.
- [33] Egert G, Dachs H. Verwendung gebogener idealkristalle als neutronenmonochromatoren [J]. Journal of Applied Crystallography, 1970, 3(4): 214-220.
- [34] del Rio M S, Perez-Bocanegra N, Shi X B, et al. Simulation of X-ray diffraction profiles for bent anisotropic crystals [J]. Journal of Applied Crystallography, 2015, 48(2): 477-491.
- [35] ESRF[EB/OL]. [2021-02-03]. <http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/xop2.4>.
- [36] Zachariasen W. Theory of X-ray diffraction in crystals[M]. New York: Dover Publications Inc., 1967.
- [37] Wu M, Kruschwitz C A, Lake P, et al. Diffraction properties of cylindrically bent KAP crystals in energy range of 2.3-7.5 keV using synchrotron radiation [J]. Applied Optics, 2021, 60(3): 558-570.
- [38] Polder D, Penning P. Anomalous transmission of X-ray in elastically deformed crystals [J]. Acta Crystallographica, 1964, 17(8): 950-955.
- [39] Balibar F, Chukhovskii F N, Malgrange C. Dynamical X-ray propagation: a theoretical approach to the creation of new wave fields [J]. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography, 1983, 39(3): 387-399.
- [40] Schulze C, Chapman D. Pepo: a program for the calculation of the reflectivity of cylindrically bent Laue crystal monochromators [J]. Review of Scientific Instruments, 1995, 66(2): 2220-2223.
- [41] Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion [J]. Acta Crystallographica, 1962, 15(12): 1311-1312.
- [42] Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1969, 26(5): 1239-1253.
- [43] Taupin D. Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux déformés [J]. Bulletin De La Société Française De Minéralogie et De Cristallographie, 1964, 87(4): 469-511.
- [44] Härtwig J. Hierarchy of dynamical theories of X-ray diffraction for deformed and perfect crystals [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2001, 34

- (10A): A70-A77.
- [45] del Rio M S, Ferrero C, Mocella V. Computer simulation of bent perfect crystal diffraction profiles [J]. *Proceedings of SPIE*, 1997, 3151: 312-323.
- [46] del Rio M S, Dejus R J. XOP v2. 4: recent developments of the X-ray optics software toolkit [J]. *Proceedings of SPIE*, 2011, 8141: 814115.
- [47] Yan H F, Li L. X-ray dynamical diffraction from single crystals with arbitrary shape and strain field: a universal approach to modeling [J]. *Physical Review B*, 2014, 89(1): 014104.
- [48] Honkanen A P, Ferrero C, Guigay J P, et al. A finite-element approach to dynamical diffraction problems in reflection geometry [J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2018, 51(2): 514-525.
- [49] Honkanen A P, Monaco G, Huotari S. A computationally efficient method to solve the Takagi-Taupin equations for a large deformed crystal [J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2016, 49(4): 1284-1289.
- [50] Wang Y H, Hu L F, Zhang B B, et al. Finite-element simulation for X-ray volume diffractive optics based on the wave optical theory [J]. *Optics Express*, 2020, 28(23): 34973-34993.
- [51] Koch J A, Landen O L, Barbee T W, et al. High-energy X-ray microscopy techniques for laser-fusion plasma research at the national ignition facility [J]. *Applied Optics*, 1998, 37(10): 1784-1795.
- [52] Zhao Y, Wei M X, Deng B, et al. Flat crystal X-ray spectrometer for quantitative spectral measurement in the 2-5 keV region [J]. *Chinese Physics Letters*, 2011, 28(6): 060701.
- [53] 赵阳, 杨家敏, 张继彦, 等. 利用平晶谱仪测量谱线波长的新方法 [J]. *中国激光*, 2008, 35(4): 587-591.
Zhao Y, Yang J M, Zhang J Y, et al. Novel method of the wavelength determination of spectral lines with planar crystal spectrometer [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2008, 35(4): 587-591.
- [54] Yang Y, Xiao J, Lu D, et al. A high precision flat crystal spectrometer compatible for ultra-high vacuum light source [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2017, 88(11): 113108.
- [55] Wang R R, Jia G, An H H, et al. Band tunable X-ray flat crystal spectrometer for laser-produced plasma spectroscopy measurements [J]. *X-Ray Spectrometry*, 2022, 51(2): 136-141.
- [56] Bond W L. Precision lattice constant determination [J]. *Acta Crystallographica*, 1960, 13(10): 814-818.
- [57] Lider V V. Precise determination of crystal lattice parameters [J]. *Physics-Usppekhi*, 2020, 63(9): 907-928.
- [58] Johann H H. Intense X-ray spectra obtained with concave crystals [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1931, 69: 185-206.
- [59] Petrulin A A, Sovestnov A E, Tyunis A V, et al. Johann crystal diffraction spectrometer for measuring small chemical shifts of soft X-ray lines [J]. *Technical Physics Letters*, 2009, 35(1): 73-75.
- [60] Johansson T. New focusing X-ray spectrometer [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1933, 82: 507-528.
- [61] von Hámos L. Röntgenspektroskopie und abbildung mittels gekrümmter kristallreflektoren. I. geometrisch-optische betrachtungen [J]. *Annalen Der Physik*, 1933, 409(6): 716-724.
- [62] Wang E, Beiersdorfer P, Gu M, et al. Calculation of the Johann error for spherically bent X-ray imaging crystal spectrometers [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2010, 81(10): 10E329.
- [63] Kieffer J C, Chaker M, Pepin H, et al. Monochromatic X-ray imaging of a laser produced plasma [J]. *Applied Optics*, 1989, 28(20): 4333-4336.
- [64] Sokaras D, Weng T C, Nordlund D, et al. A seven-crystal Johann-type hard X-ray spectrometer at the Stanford Synchrotron Radiation Light Source [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2013, 84(5): 053102.
- [65] Belyaev L M, Gil'varg A B, Mikha22lov Y A, et al. High-luminosity X-ray spectrograph with a spherically bent crystal analyzer, designed for laser plasma diagnostics [J]. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 1977, 7(1): 67-70.
- [66] 刘利锋. 等离子体 X 射线球面弯曲晶体成像关键技术研究 [D]. 重庆: 重庆大学, 2012.
Liu L F. Study on key technology of X-ray imaging for plasmas based on spherically bent crystal [D]. Chongqing: Chongqing University, 2012.
- [67] 刘利锋, 肖沙里, 毋玉芬, 等. 基于石英球面弯曲晶体的 X 射线成像研究 [J]. *中国激光*, 2011, 38(8): 0815001.
Liu L F, Xiao S L, Wu Y F, et al. Study of X-ray backlight imaging based on spherically bent quartz crystal [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2011, 38(8): 0815001.
- [68] Honkanen A P, Ollikkala S, Ahopelto T, et al. Johann-type laboratory-scale X-ray absorption spectrometer with versatile detection modes [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(3): 033107.

- [69] Jahrman E P, Holden W M, Ditter A S, et al. Vacuum formed temporary spherically and toroidally bent crystal analyzers for X-ray absorption and X-ray emission spectroscopy [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(1): 013106.
- [70] Jahrman E P, Holden W M, Ditter A S, et al. An improved laboratory-based X-ray absorption fine structure and X-ray emission spectrometer for analytical applications in materials chemistry research[J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(2): 024106.
- [71] 忻秋琪, 李亚冉, 陈亮, 等. 四通道球面弯晶成像系统设计及实验研究[J]. *强激光与粒子束*, 2019, 31(5): 052001.
Xin Q Q, Li Y R, Chen L, et al. Design and experimental research of four-channel spherically bent crystal imaging system[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2019, 31(5): 052001.
- [72] Hell N, Beiersdorfer P, Brown G V, et al. Recent enhancements in the performance of the Orion high-resolution X-ray spectrometers [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2021, 92(4): 043507.
- [73] Uschmann I, Fujita K, Niki I, et al. Time-resolved ten-channel monochromatic imaging of inertial confinement fusion plasmas [J]. *Applied Optics*, 2000, 39(31): 5865-5871.
- [74] Schollmeier M S, Geissel M, Shores J E, et al. Performance of bent-crystal X-ray microscopes for high energy density physics research [J]. *Applied Optics*, 2015, 54(16): 5147-5161.
- [75] Schollmeier M S, Loisel G P. Systematic search for spherical crystal X-ray microscopes matching 1–25 keV spectral line sources[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2016, 87(12): 123511.
- [76] 姚童, 黎森, 施军, 等. 钛靶 X 射线超环面晶体衍射高分辨率聚焦诊断技术研究 [J]. *中国激光*, 2021, 48(21): 2103002.
Yao T, Li M, Shi J, et al. High-resolution focusing diagnosis technology on Ti-target X-ray diffraction using toroidal crystals [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2021, 48(21): 2103002.
- [77] Jiang C L, Xu J, Mu B Z, et al. Four-channel toroidal crystal X-ray imager for laser-produced plasmas[J]. *Optics Express*, 2021, 29(4): 6133-6146.
- [78] Anklamm L, Schlesiger C, Malzer W, et al. A novel von Hamos spectrometer for efficient X-ray emission spectroscopy in the laboratory[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2014, 85(5): 053110.
- [79] 鲁建. 稠密等离子体诊断用 X 射线均匀色散弯晶谱仪研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2015.
- Lu J. Research of X-ray bent crystal spectrometer with uniform dispersion for dense plasmas diagnostics[D]. Chongqing: Chongqing University, 2015.
- [80] Shevelko A P, Kasyanov Y S, Yakushev O F, et al. Compact focusing von Hamos spectrometer for quantitative X-ray spectroscopy [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2002, 73(10): 3458-3463.
- [81] Abraham B, Nowak S, Weninger C, et al. A high-throughput energy-dispersive tender X-ray spectrometer for shot-to-shot sulfur measurements [J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2019, 26(3): 629-634.
- [82] Kalinko A, Caliebe W A, Schoch R, et al. A von Hamos-type hard X-ray spectrometer at the PETRA III beamline P64 [J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2020, 27(1): 31-36.
- [83] Rani S S, Lee J H, Kim Y. 200-mm segmented cylindrical figured crystal for von Hamos X-ray spectrometer[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2020, 91(1): 013101.
- [84] Ismail I, Journal L, Vacheresse R, et al. A von Hamos spectrometer based on highly annealed pyrolytic graphite crystal in tender X-ray domain [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2021, 92(7): 073104.
- [85] Hall T A. A focusing X-ray crystal spectrograph [J]. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 1984, 17(2): 110-112.
- [86] Martinolli E, Koenig M, Boudenne J M, et al. Conical crystal spectrograph for high brightness X-ray K_{α} spectroscopy in subpicosecond laser-solid interaction[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2004, 75(6): 2024-2028.
- [87] Levy A, Dorchie F, Fourment C, et al. Double conical crystal X-ray spectrometer for high resolution ultrafast X-ray absorption near-edge spectroscopy of Al K edge [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2010, 81(6): 063107.
- [88] Pikuz S A, Shelkovenko T A, Mitchell M D, et al. Extreme luminosity imaging conical spectrograph [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2006, 77(10): 10F309.
- [89] 阳庆国, 李泽仁, 彭其先, 等. 圆柱面和圆锥面弯晶谱仪的理论计算及设计[J]. *光学学报*, 2009, 29(2): 382-387.
Yang Q G, Li Z R, Peng Q X, et al. Theoretical calculation and design for cylindrical and conical bent crystal spectrograph[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, 29(2): 382-387.
- [90] Robledo J I, Pérez C A, Sánchez H J. A compact

- high-resolution spectrometer based on a segmented conical crystal analyzer [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2020, 91(4): 043105.
- [91] Andiel U, Eidmann K, Pisani F, et al. Conical X-ray crystal spectrometer for time integrated and time resolved measurements [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2003, 74(4): 2369-2374.
- [92] Morishita K, Hayashi K, Nakajima K. One-shot spectrometer for several elements using an integrated conical crystal analyzer [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2012, 83(1): 013112.
- [93] Bitter M, Hill K W, Gao L, et al. A multi-cone X-ray imaging Bragg crystal spectrometer [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2016, 87(11): 11E333.
- [94] Shi J, Bitter M, Hill K W, et al. Investigation of multi-cone geometry imaging with laser lights [J]. *The Review of Scientific Instruments*, 2017, 88(12): 123116.
- [95] Nakajima K, Fujiwara K, Pan W, et al. Shaped silicon-crystal wafers obtained by plastic deformation and their application to silicon-crystal lenses [J]. *Nature Materials*, 2005, 4(1): 47-50.
- [96] Shi J, Yao T, Li M, et al. High efficiency X-ray diffraction diagnostic spectrometer with multi-curvature bent crystal [J]. *Chinese Optics Letters*, 2020, 18(11): 113401.
- [97] 肖沙里, 唐跃林, 熊先才, 等. X 射线椭圆弯晶谱仪实验研究 [J]. *光学 精密工程*, 2004, 12(4): 415-419.
Xiao S L, Tang Y L, Xiong X C, et al. Experimentation of the X-ray elliptical crystal spectrograph [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2004, 12(4): 415-419.
- [98] Wang R R, An H H, Xie Z Y, et al. Performance of an elliptical crystal spectrometer for SGII X-ray opacity experiments [J]. *High Power Laser Science and Engineering*, 2018, 6: e3.
- [99] Shi J, Guo Y C, Xiao S L, et al. A novel X-ray spectrometer for plasma hot spot diagnosis [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2017, 866: 72-75.
- [100] Xia G, Wang G D, Sun Y C, et al. Design and resolution analysis of parabolic mirror spectrometer [J]. *Proceedings of SPIE*, 2017, 1046: 104611B.
- [101] Bitter M, Pablant N, Hill K W, et al. A new class of focusing crystal shapes for Bragg spectroscopy of small, point-like, X-ray sources in laser produced plasmas [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2021, 92(4): 043531.
- [102] Pablant N A, Bitter M, Efthimion P C, et al. Design and expected performance of a variable-radii sinusoidal spiral X-ray spectrometer for the National Ignition Facility [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2021, 92(9): 093904.
- [103] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.
- [104] Qi D L, Zhang S A, Yang C S, et al. Single-shot compressed ultrafast photography: a review [J]. *Advanced Photonics*, 2020, 2(1): 014003.
- [105] 王峰, 理玉龙, 关赞洋, 等. 压缩感知技术在激光惯性约束聚变研究中的应用 [J]. *强激光与粒子束*, 2022, 34(3): 031021.
Wang F, Li Y L, Guan Z Y, et al. Application of compressed sensing technology in laser inertial confinement fusion [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2022, 34(3): 031021.