

一种新型硬 X 射线超高能量分辨弯晶光谱仪

杨志诚^{1,2,4}, 李宾^{1,2,3,4*}¹中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800;²中国科学院上海高等研究院上海同步辐射光源, 上海 201204;³上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210;⁴中国科学院大学, 北京 100049

摘要 基于目前世界上先进光源的硬 X 射线光谱仪的设计算法, 采用圆柱面强弯曲布拉格晶体分光实现高能量分辨。提出了一种新型二次衍射分光光谱仪结构, 可在 3~25 keV 光子能量范围内实现单发脉冲 2×10^5 的能量分辨率。运用理论分析和数值计算验证了光谱仪的能量分辨性能, 并通过机械扫描得到带宽大于 1% 的重组光谱。该技术可以用于测量上海硬 X 射线自由电子激光装置 (SHINE) 硬 X 射线波段自放大自发辐射光谱中的细锐结构以及用户科学实验中的高分辨光谱的探测和应用, 具有重要的研究价值和意义。

关键词 X 射线光学; 光谱仪; 圆柱面强弯曲晶体; 硬 X 射线自由电子激光; 单发在线测量

中图分类号 O434.12

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1134018

Hard X-Ray Bent Crystal Spectrometer with High Energy Resolution

Yang Zhicheng^{1,2,4}, Li Bin^{1,2,3,4*}¹Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;²Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China;³School of Physical Science and Technology, Shanghai Tech University, Shanghai 201210, China;⁴University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract Based on design algorithms of hard X-ray spectrometers in advanced light sources around the world, high energy resolution is realized by adopting cylindrically bent Bragg crystals. A new structure of a double diffraction spectrometer is proposed, which can achieve 2×10^5 energy resolution of single pulse in the photon energy range of 3–25 keV. The energy resolution performance of the spectrometer is verified by theoretical analysis and numerical calculation. And a broad spectrum with bandwidth beyond 1% can be reconstructed via mechanical scan. This technique can potentially be used to measure the fine structure in self-amplified spontaneous emission (SASE) spectra within hard X-ray spectral range for Shanghai High Repetition Rate hard X-ray free electron laser (XFEL) and Extreme Light Facility (SHINE), and it can be applied to detection and application of the cutting edge user scientific researches demanding high resolving power, preserving important merit of value in science and technology.

Key words X-ray optics; spectrometer; strongly bent cylindrical crystals; hard X-ray free electron laser; single shot online measurement

收稿日期: 2022-04-01; 修回日期: 2022-04-20; 录用日期: 2022-05-04

基金项目: 国家自然科学基金(11975299)、国家 973 项目(2016YFA0401901)

通信作者: *libin1995@sinap.ac.cn

1 引言

X 射线自由电子激光(XFEL)主要以自放大自发辐射(SASE)模式出光,每一发射脉冲的光谱和强度都不尽相同^[1-3]。精确测量 XFEL 辐射脉冲的特性,可用于反馈 XFEL 装置机器的调试和优化。同时,通过对每个 X 射线脉冲进行高精度的表征,可向用户传递可靠的光源参数信息,用于归一化信号数据强度、修正频谱及时域信息^[4-7]等。由于 SASE 脉冲是一种部分相干光源,其辐射光谱中包含多个尖峰。其中典型尖峰的能谱宽度与 X 射线脉冲的长度有关,因此高分辨光谱测量也可以用来间接反映 XFEL 脉冲持续时间^[8]。对于相干性更高的种子型自由电子激光^[9-11],得到精确的测量光谱也是开展进一步科学研究的前提条件。

光谱仪最重要的两个指标是光子能量范围和能量分辨率。对于 SASE 光谱来说,其整个谱宽和频谱中单个尖峰的宽度分别对应于辐射脉冲的相干时间长度和辐射脉冲长度。

软 X 射线光谱测量一般采用光栅^[12-13]或者多层镀膜^[14-15]分光的方法;同时,已研制世界各地的先进 XFEL 光源装置中多种技术方案用于测量硬 X 射线波段 XFEL 的辐射脉冲光谱。例如,日本 SPring-8 angstrom compact free electron laser (SACLA) 的 Inubushi 等^[16]利用高精度椭圆镜和平面硅晶体获得单发光谱(2012 年);美国 Linac Coherent Light Source(LCLS)的 Zhu 等^[17](2012 年)、Rich 等^[18](2016 年),以及欧洲 European XFEL 的 Boesenberg 等^[19](2017 年)采用子午面柱形薄 Si/C 晶体的布拉格反射光束实现单发脉冲的在线测量,同时布拉格反射光束大部分以透射光束形式传输至下游科学实验区;瑞士 Paul Scherrer Institute 的 Makita 等^[20](2015 年)、SwissFEL 的 Rehanek 等^[8](2017 年)、David 等^[21](2021 年),以及 European XFEL 的 Kujala 等^[22](2020 年)利用金刚石透射光栅,并用 Si/C 圆柱面弯曲晶体对光栅一级衍射光进行单发光谱测量,将零级光用于科学实验。Samoylova 等^[23](2019 年)在欧洲 XFEL 装置上研制了测量硬 X 射线 SASE 脉冲的强圆柱面弯曲金刚石晶体光谱仪,发现圆柱面弯曲晶体的摇摆曲线比平面晶体的摇摆曲线宽得多;针对不同的弯曲半径测量了 C(440)晶相的反射摇摆曲线,实验数据与 Takagi-Taupin 动力学衍射方程的理论模型相匹配,均匀的应变梯度已被证明是晶

体中应变变形的有效模型。

圆柱面弯曲晶体 Si/C 光谱仪在高重复频率硬 X 射线在线光谱诊断中有重要的应用价值。未来圆柱面弯曲晶体的研制将追求更高的能量分辨率和更大的能谱范围,而圆柱面弯曲金刚石晶体将是硬 X 射线在线诊断光谱仪的核心组件,比 Si 基弯晶有更优异的热传导和热耗散性能,更有利于高重复频率 XFEL 的运行模式。本文基于圆柱面强弯曲薄金刚石晶体进行高分辨光谱仪的原理研究以及参数设计,并进行相关理论计算和可行性分析。新型的二次衍射分光设计的理论分辨率比当前主流的硬 X 射线光谱仪有极大的提升,而且结构紧凑。

2 基本原理

用于测量硬 X 射线自由电子激光光谱的光谱仪主要是通过圆柱面弯曲的金刚石或者硅晶体来实现光谱衍射分光 and 测量。使用椭圆镜和平面晶体的组合虽然也能进行光谱衍射分光,但是无法进行在线测量。所以弯曲晶体通过布拉格反射将部分光束进行反射以用于在线测量,利用透射光束可以同时进行实验,这保证了单发测量的可行性和实验数据的可靠性。

圆柱面弯曲晶体硬 X 射线光谱仪的工作原理如图 1 所示,XFEL 的发散角很小,可以忽略,XFEL 可以近似为平行光入射到晶体,被凸柱面弯曲晶体反射,大部分光可穿透晶体。

对布拉格公式 $2d \cdot \sin \theta = \lambda$ 进行微分,可得

$$\frac{\Delta E}{E} = \Delta \theta_1 \cot \theta_1, \quad (1)$$

式中: E 为光子能量; ΔE 为最小可分辨能量差; θ_1 为弯曲晶体 1 的中心能量布拉格角; $\Delta \theta_1$ 为最小可分辨波长 $\Delta \lambda$ 通过晶体 1 后的布拉格衍射角度分布。设最小可分辨相邻波长对应于探测器上相邻像素间距 Δx (即探测器像素尺寸 p), $L_1 = R_1 \times \sin \theta_1 / 2$ 为晶体 1 上反射光线的反向延长线相交于虚源 O' 点到晶体表面入射点之间的距离^[17], R_1 为晶体 1 的子午半径, L_2 为晶体 1 到探测器(或者晶体 2)的距离。第一次反射相当于虚源 O' 处的点光源传播, $L = L_1 + L_2$, 则有

$$\Delta x = p = 2\Delta \theta_1 L = 2 \left(\frac{\Delta E}{E} \tan \theta_1 \right) (L_1 + L_2) = 2 \left(\frac{\Delta E}{E} \tan \theta_1 \right) \left(\frac{R_1 \sin \theta_1}{2} + L_2 \right). \quad (2)$$

经整理可得,一次衍射分光的理论分辨率为

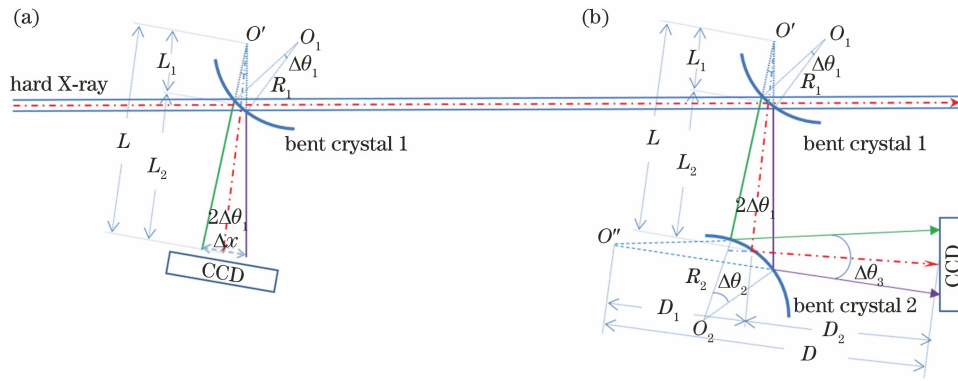


图 1 弯晶光谱仪。(a)一次衍射原理图;(b)二次衍射原理图

Fig. 1 Schematic diagrams of bent spectrometers. (a) Principle of single Bragg diffraction; (b) principle of double diffraction

$$R_{\text{res1}} = \frac{E}{\Delta E} = \frac{2 \tan \theta_1 \left(\frac{R_1 \sin \theta_1}{2} + L_2 \right)}{p} \quad (3)$$

如图 1(b)所示,经一次反射后,在原有探测器的位置上放置一块弯曲晶体 2,其弯曲半径为 R_2 ,显然,在布拉格反射的达尔文宽度内,相邻波长的分开角度会分散得更开。

由几何关系可得,入射到弯曲晶体 2 上的两点间对应的圆心角为

$$\Delta \theta_2 = \frac{2L}{R_2 \sin \theta_2} \Delta \theta_1, \quad (4)$$

式中: θ_2 为弯曲晶体 2 的中心能量布拉格角。

二次反射后分开的张角为

$$\Delta \theta_3 = \Delta \theta_2 + \Delta \theta'_1 = \frac{2L}{R_2 \sin \theta_2} \Delta \theta_1 + \frac{d_1 \cos \theta_1}{d_2 \cos \theta_2} \Delta \theta_1 = \left(\frac{2L}{R_2 \sin \theta_2} + \frac{d_1 \cos \theta_1}{d_2 \cos \theta_2} \right) \Delta \theta_1, \quad (5)$$

式中: $\Delta \theta'_1 = \frac{d_1 \cos \theta_1}{d_2 \cos \theta_2} \Delta \theta_1$ 为相邻波长间隔 $\Delta \lambda$ 在晶体 2 上布拉格角的角度差; d_1 、 d_2 为晶体 1、2 的晶格间距; θ_1 、 θ_2 为晶体 1、2 的中心能量布拉格角。

弯曲晶体 2 到探测器的距离为 D_2 ,第二次反射时,反射光线的反向延长线相交于 O'' 点。由几何关系可得虚源 O'' 到弯曲晶体 2 的距离 $D_1 = \frac{R_2 \sin \theta_2}{\Delta \theta_3 / \Delta \theta_2}$ 。所以虚源 O'' 到探测器的距离 $D = D_1 + D_2 = \frac{R_2 \sin \theta_2}{\Delta \theta_3 / \Delta \theta_2} + D_2$ 。假设像素尺寸为 p ,则有 $\Delta \theta_3 \cdot D = p$ 。联立式(1)和(5),整理可得像素的能谱分辨率的理论公式为

$$R_{\text{res2}} = \frac{E}{\Delta E} = \frac{D}{p} \tan \theta_1 \left(\frac{R_1 \sin \theta_1 + 2L_2}{R_2 \sin \theta_2} + \frac{d_1 \cos \theta_1}{d_2 \cos \theta_2} \right). \quad (6)$$

当两块晶体采用相同的晶向时,如都用 C(220) 晶向,则 $\theta = \theta_1 = \theta_2$,那么二次反射之后,反射光依然平行于主光束。对于改变能量的情况,只需同时以各自的入射点为中心旋转两个晶体,移动第二块晶体到一次反射的 2θ 位置,将探测器平移到对应出射光位置即可,这有利于工程设计的实现。则式(6)可简化为

$$R_{\text{res2}} = \frac{E}{\Delta E} = \frac{D}{p} \tan \theta \left(\frac{R_1 \sin \theta + 2L_2}{R_2 \sin \theta} + 1 \right). \quad (7)$$

由图 1(a)可以看出:一次衍射分光时,相邻波长只分开了 $2\Delta \theta_1$,而由式(5)可以看出,二次衍射分光最终的分开角度为 $\left(\frac{2L}{R_2 \sin \theta_2} + \frac{d_1 \cos \theta_1}{d_2 \cos \theta_2} \right) \Delta \theta_1$,可以通过改变 R_1 、 R_2 、 L_2 ,大幅提高分辨率。值得注意的是,二次衍射是在达尔文角宽度内才适用的。圆柱面强弯曲晶体(弯曲半径在几十厘米量级)的达尔文角宽度约是平面晶体的 10 倍以上^[17]。

3 参数设计与分析

3.1 谱仪结构及不同能量段工况

为了覆盖 SHINE 的 3~25 keV 光子能量段,需要使用不同晶向的弯曲晶体,使布拉格角尽量在 $30^\circ \sim 60^\circ$ 的范围内,那么衍射角在 $60^\circ \sim 120^\circ$ 的范围内,这便于一次衍射分光的工程实现。一次衍射分光时需要较长的探测距离以提高分辨率,而二次衍射分光只需调整两块晶体间距,即可较大范围地调整分辨率。进行一次衍射分光探测时,探测器要放在一个摆臂上,这需要较大空间;而二次衍射分光出射光仍平行于主光路方向,探测器移动范围较小,因此可以使得结构更为紧凑。二次衍射分光由于更加紧凑,用不到摆臂,所以角度范围可适当拓宽。

图 2 为金刚石和硅晶体的不同晶向覆盖能量段

分析结果。总体来看,C(111)可以在 $80^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖 3~6 keV,C(220)可以在 $60^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖 5.5~10 keV,C(333)可以在 $63^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖 10~18 keV,C(440)可以在 $62^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖 11~20 keV,而 C(555)可以在 $63^\circ\sim 37^\circ$ 布拉格角时覆盖 17~25 keV。

Si(111)能在 $42^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖 3~4 keV, Si(220)能在 $60^\circ\sim 28^\circ$ 布拉格角时覆盖 3.7~6.8 keV, Si(333)能在 $60^\circ\sim 30^\circ$ 布拉格角时覆盖

6.8~12 keV, Si(440)能在 $60^\circ\sim 29^\circ$ 布拉格角时覆盖 7.5~13 keV, Si(555)能在 $60^\circ\sim 23^\circ$ 布拉格角时覆盖 11~25 keV。

表 1 给出了两种晶体在不同晶向情况下的晶格间距(数据来源: XOP)。由布拉格公式可知,对于不同的晶格常数,一定的衍射角度范围对应于不同的波长范围(或光子能量段)。可以选择具有合适晶格间距的晶体来覆盖所需的能量段,从而保证衍射角度在合适的测量范围内。

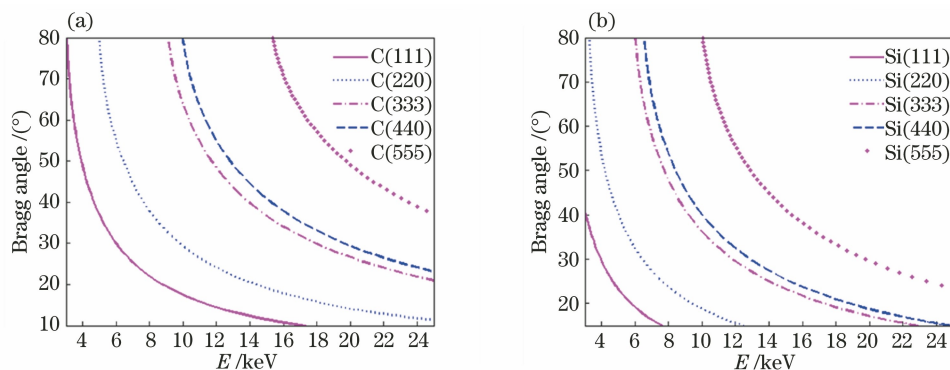


图 2 金刚石和硅晶体的不同晶向覆盖能量段分析结果。(a)金刚石不同晶向覆盖 3~25 keV 对应的布拉格角范围;
(b)硅晶体不同晶向覆盖 3~25 keV 对应的布拉格角范围

Fig. 2 Analysis results of energy segments for different orientation of diamond and silicon crystals. (a) Bragg diffraction angle for diamond in energy range of 3–25 keV; (b) Bragg diffraction angle for silicon crystals in energy range of 3–25 keV

表 1 两种晶体(硅和金刚石)6 种晶向的晶格间距

Table 1 Lattice spacing of two crystals (silicon and diamond) with six different crystal orientations

Crystal orientation	111	220	333	400	440	555
Spacing of silicon /nm	0.3135	0.1920	0.1045	0.1358	0.0960	0.0627
Spacing of diamond /nm	0.2059	0.1261	0.0686	0.0892	0.0631	0.0412

对于 3~25 keV 的能量范围,不同晶向的金刚石晶体切换以及运动效果图如图 3 所示。以图 3 (a)中 3~6 keV 情况为例,X 射线入射到弯晶 1 的中心点 O ,以此为坐标原点及弯晶 1 的旋转中心,旋转变晶 1 使入射点处切线(虚线)与入射光束的夹角满足布拉格角 θ 。将弯晶 2 以 O 点为圆心、 L_2 为半径绕 O 点旋转到入射光线的 2θ 方向位置 $(x_2, y_2) = (L_2 \cos 2\theta, L_2 \sin 2\theta)$ (设 x 轴正方向朝右, y 轴正方向朝下),此为光线入射到弯晶 2 的中心坐标,再绕 (x_2, y_2) 旋转变晶 2 使之满足布拉格反射条件;将 X 射线探测器或 CCD 移动到坐标 $(D_2 + L_2 \cos 2\theta, L_2 \sin 2\theta)$ 处进行探测。在此能量段内切换能量,只要将两块晶相各自旋转到相应角度(短划线为另一个布拉格衍射条件下的晶体切线),并将晶体 2 移动到对应坐标即可。切换到其他能量段时,需要切换晶体,依据上述过程进行调整对准,详见图 3(b)~(d)。

为了直观看出晶体 2 和探测器在各能量段的运动轨迹,对于图 3 中的 4 个能段,设 $D_2 = 0.5$ m,并略微改变晶体 1 与 2 的间距 L_2 ,使间距为 0.2, 0.21, 0.22, 0.23 m,图 4 为二次衍射分光光谱仪在各能量范围内晶体 2 的旋转中心与探测器中心的位置扫描轨迹图。

3.2 能量分辨理论计算

设置弯晶常用的一些参数^[19]:对两块 C(220) 晶体,取 $R_1 = R_2 = 10$ cm, $L_2 = 0.2$ m, $D_2 = 0.5$ m, $p = 20$ μ m,通过式(7)可以计算得到在对应能量范围下的理论分辨率,如图 5(a)中实线所示,图中以一次衍射分光作为对照组。此时把 L_2 处弯晶 2 换成探测器,由式(3)计算可得,在 5.5~10 keV 光子能量段,二次分辨率为 $(1.5\sim 3.5) \times 10^5$,而一次衍射分光的分辨率为 $(2\sim 5) \times 10^4$ 。图 5(b)展示了上述结构的二次衍射分光随距离 L_2 的改变,其他参数不变。图 5(b)中的点划线和实线分别对应

$L_2=0.3\text{ m}$ 及 $L_2=0.1\text{ m}$ 时的二次理论分辨率。而图 5(c)、(d) 展示的是在 $10\sim 20\text{ keV}$ 光子能量段, 将 C(220) 晶向切换成 C(440) 晶向后, 采用以上

参数画出的一次、二次衍射分光的理论分辨率对比, 以及二次衍射分光随 L_2 的变化图。

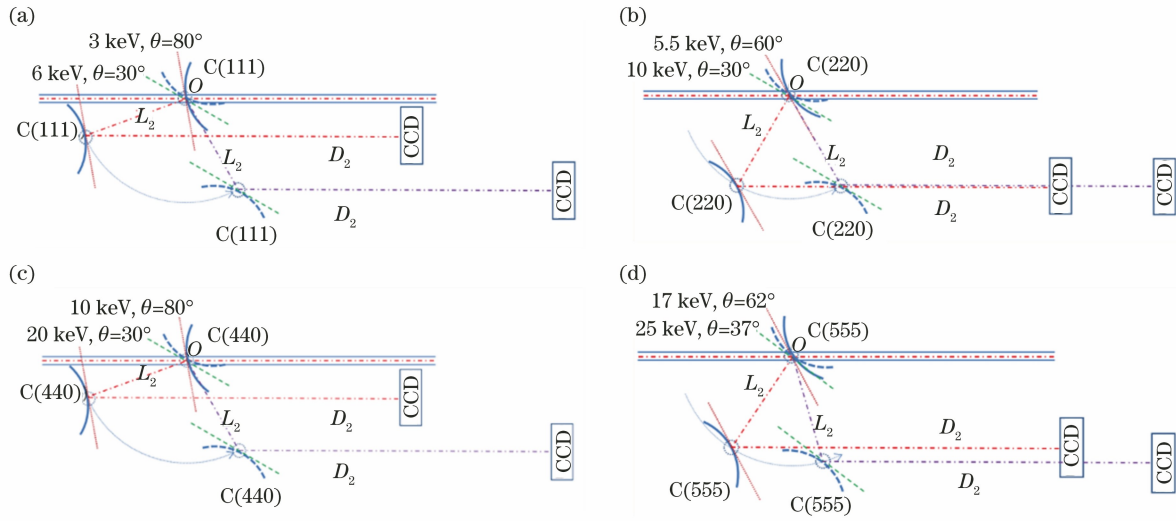


图 3 二次衍射分光光谱仪工作原理示意图。(a) 3~6 keV; (b) 5.5~10 keV; (c) 10~20 keV; (d) 17~25 keV

Fig. 3 Diagrams of working principles of double diffraction spectrometer.

(a) 3~6 keV; (b) 5.5~10 keV; (c) 10~20 keV; (d) 17~25 keV

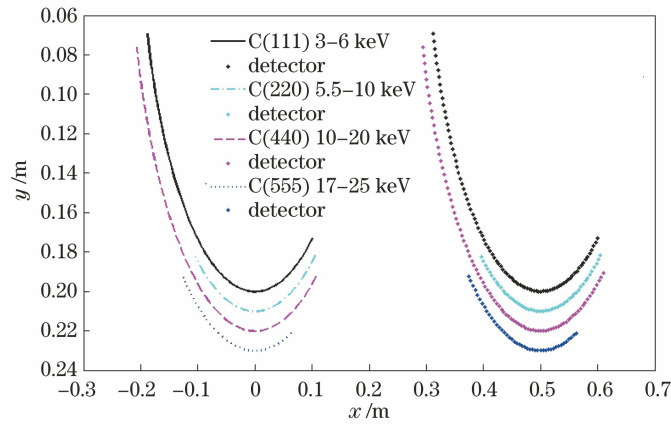


图 4 二次衍射分光光谱仪在各能量范围内, 晶体 2 旋转中心与探测器中心的位置扫描轨迹 (均以晶体 1 旋转中心 O 为坐标原点)

Fig. 4 Position sweep trajectories of rotation center of crystal 2 and detector center of double diffraction spectrometer in each energy range (taking rotation center O of crystal 1 as origin of coordinate)

根据目前相关文献中的报道, 弯晶一次衍射分光的能量分辨率一般在 3×10^4 左右。但通过二次衍射分光可以比较容易地提高光谱仪的理论分辨率。而且光谱仪的能量分辨率还可以通过改变参数 L_2 来进行较大范围的调整。所以可根据实际应用中的需求, 优化二次衍射分光光谱仪的结构和参数。

3.3 带宽分析

对于束宽为 H 的近似平行光束, 由式(1)以及几何关系可知 $\Delta\theta = \frac{H}{R \sin \theta}$, 此处 $\Delta\theta$ 为束宽为 H 的

平行光在弯曲晶体上进行布拉格反射的角度范围, θ 为中心布拉格角。由此可得, 弯晶单次反射的带宽 ($B_{w1} = \Delta E/E$) 与束斑大小及布拉格角的关系如下:

$$B_{w1} = \frac{H}{R \sin \theta \tan \theta} \quad (8)$$

对于上面分析的参数, 取晶体弯曲半径为 0.1 m , 可以画出在一次衍射分光时不同布拉格角和入射孔径下的最大接收带宽的范围, 如图 6(a) 所示。若 H 取较大值, 则一次衍射分光时可以覆盖更大的带宽; 光斑较小会导致覆盖带宽较窄。通过改

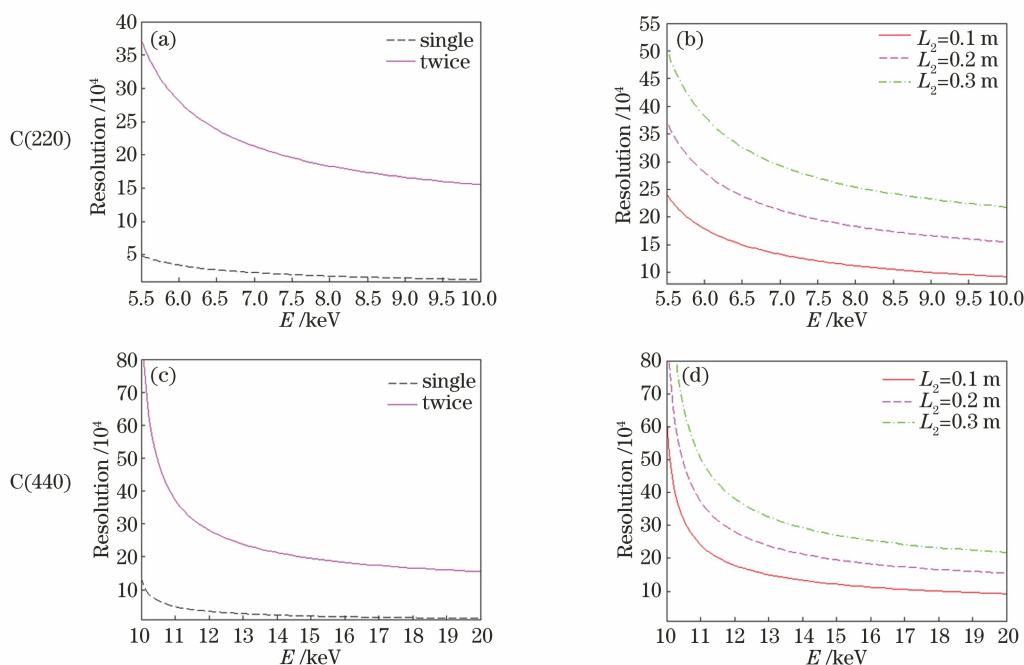


图 5 $R_1=R_2=0.1\text{ m}$, $D_2=0.5\text{ m}$, $p=20\text{ }\mu\text{m}$ 时双弯晶 C(220) 结构和

C(440) 结构的一次衍射分光与二次衍射分光的理论分辨率。(a)(c) $L_2=0.2\text{ m}$; (b)(d) $L_2=0.1, 0.2, 0.3\text{ m}$

Fig. 5 Theoretical resolution of single and double Bragg diffraction for bent C(220) crystal and bent C(440) crystal when $R_1=R_2=0.1\text{ m}$, $D_2=0.5\text{ m}$, and $p=20\text{ }\mu\text{m}$. (a)(c) $L_2=0.2\text{ m}$; (b)(d) $L_2=0.1, 0.2, 0.3\text{ m}$

变光斑的大小即可轻易实现覆盖 1% 的能带宽度^[18-20]。

二次衍射分光可以实现超高能量分辨率, 但单发能带较窄, 需要精准平移晶体 2 才能覆盖足够宽的重组带宽。

使用文献[23]中的强弯曲晶体参数进行计算分析。取 $R_1=R_2=0.1\text{ m}$, $L_2=0.1\text{ m}$, 弯晶 C(440) 结构在光子能量为 14.4 keV ($\theta=43^\circ$) 时的摇摆曲线半峰全宽为 $224\text{ }\mu\text{rad}$ 。由于达尔文角宽度正比于 $\tan\theta$ ^[24-25], 由 $224\text{ }\mu\text{rad}/\tan 43^\circ \approx 240\text{ }\mu\text{rad}$ 可以算得此时 C(440) 的角达尔文宽度 ω (单位为 μrad) 为

$$\omega = 240 \tan \theta. \quad (9)$$

根据在二次衍射分光时角达尔文宽度范围内覆盖的相邻波长个数, 结合式(7)与式(9)可以算得二次反射的带宽 B_{w_2} 为

$$B_{w_2} = \frac{\omega}{R_{\text{res}2} \Delta\theta_2} = 2.4 \times 10^{-4} \frac{R_2 \sin \theta}{R_1 \sin \theta + 2L_2}. \quad (10)$$

画出二次带宽的曲线如图 6(b) 所示, 可以看到: 对于以上参数, 二次衍射分光的带宽在 $(5\sim 8) \times 10^{-5}$ 范围内, 与 SASE 中单个尖峰的带宽基本相符。虽然尖峰的带宽随光子能量的升高而减小, 但是其变化趋势基本和 B_{w_2} 的变化一致, 通过调整光

谱仪参数可以改变 B_{w_2} , 使之与不同光子能量 SASE 谱的尖峰带宽相符, 那么相应地, 可以测量的数据点如图 6(b) 中空心方形所示。图 6(c) 是一个典型的 SASE 频谱, 矩形框中的单个尖峰带宽在相应光子能量段的典型值为 0.5×10^{-4} 。图 6(d) 中 5 个示意图表示当调整二次带宽使其与相应的单峰带宽一致时, 根据图 5(c) 中光谱仪在不同能量范围的分辨率, 可以得到各能量 SASE 谱中的单峰能够探测到的数据点数。

通过精细地平移扫描弯晶 2 的布拉格角范围, 即可获得一个和弯晶 1 带宽一致的重组光谱, 虽然不同发的 SASE 光谱是随机的, 但是此重组光谱对于理解 SASE 的精细结构以及通过傅里叶变换获取时域信息具有积极的意义。

3.4 单色光束讨论

对于足够宽理想的单色平行光斑, 其经过圆柱面弯晶后在探测器的成像大小可为像素大小的选择提供参考。如图 7 所示, 理想的单色平行入射光斑可分成三部分: 在弯晶前表面的反射, 在弯晶后表面的反射, 以及在弯晶理想布拉格反射入射角处的反射。对于厚度 $t=20\text{ }\mu\text{m}$ 、弯曲半径 $R=0.1\text{ m}$ 的金刚石(440)晶体, 根据文献[23]中参数可以计算得到在中心能量为 13.9 keV 时 ($\theta=45^\circ$) 达尔文宽度

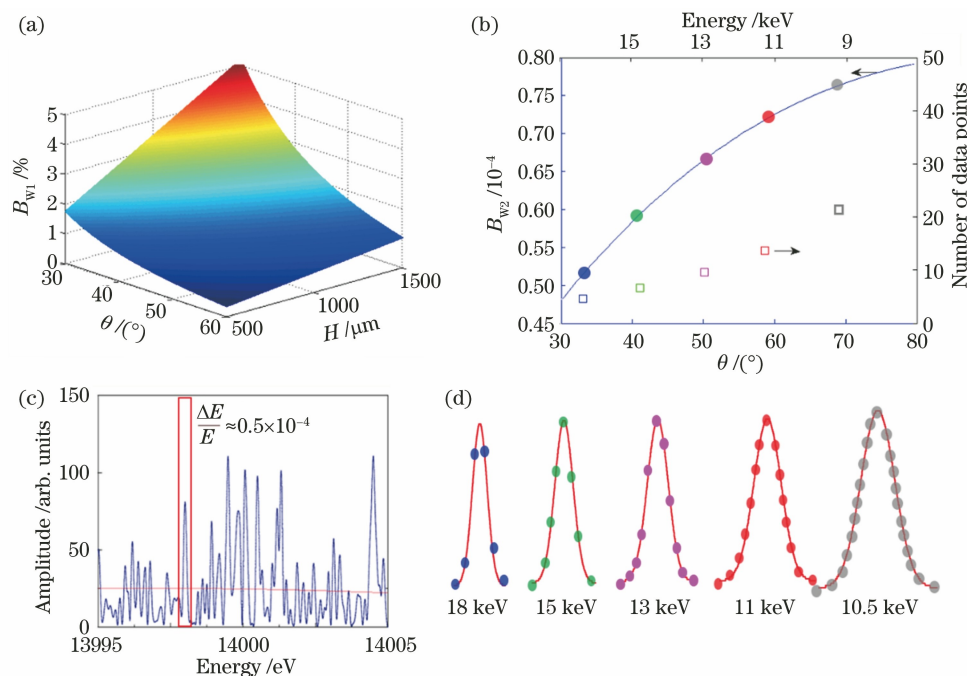


图 6 二次衍射分光的带宽以及带宽内可测量数据点。(a)一次衍射分光条件下带宽三维图,给定 $R=0.1\text{ m}$; (b)不同光子能量处二次衍射分光带宽(空心方形代表二次衍射分光可以探测的数据点数); (c)典型的 SASE 频谱以及内部尖峰的示意图; (d)在几个不同能量下单个尖峰可测得数据点数示意图

Fig. 6 Bandwidth of double diffraction spectra and data points in bandwidth. (a) Three-dimensional image of bandwidth for single Bragg diffraction when $R=0.1\text{ m}$; (b) bandwidth for double Bragg diffraction at different photon energy (empty square represents number of data points within bandwidth obtained by double Bragg diffraction); (c) typical SASE spectrum including multiple spikes; (d) schematic diagram of data points measured at several different energy within single spike

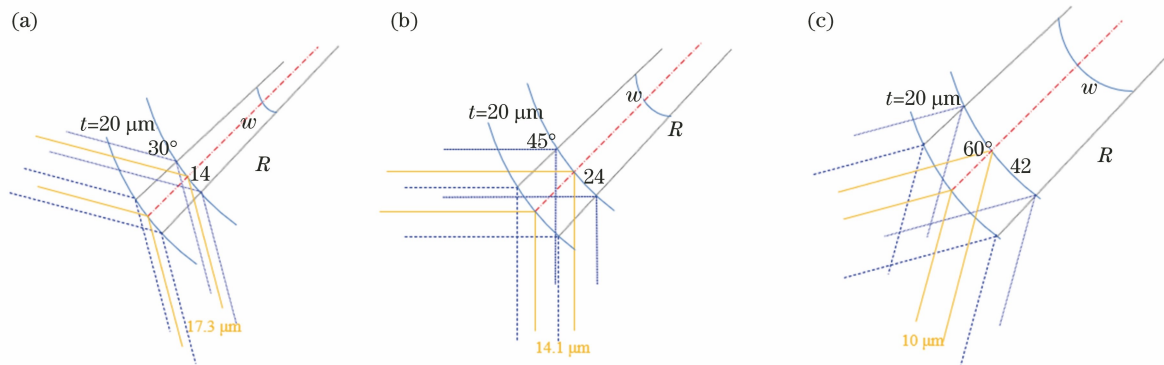


图 7 $R=0.1\text{ m}$, $t=20\text{ }\mu\text{m}$ 时不同达尔文角宽度下的单色光分析结果。(a) 30° ; (b) 45° ; (c) 60°

Fig. 7 Monochromatic light analysis results at different Darwin angular width when $R=0.1\text{ m}$ and $t=20\text{ }\mu\text{m}$. (a) 30° ; (b) 45° ; (c) 60°

$\omega=240\text{ }\mu\text{rad}$ 。对于平行光入射,弯晶达尔文宽度限制了一个有效弧长区域($\omega R=24\text{ }\mu\text{m}$)。由于在弧长的不同位置入射角不同,只有中心处的反射率最大,所以反射率最大的截面在点划线处,对应的出射光束宽约为 $14.1\text{ }\mu\text{m}$,如图 7(b)所示。为了便于理解,根据式(9)算出 30° 和 60° 布拉格角时的角达尔文宽度,再分别算出各自的有效弧长区域,如图 7

(a)、(c)所示,虽然该区域变化比较大,但是反射率最大的中心位置始终在点划线截面处,所以单色光束的出射光半峰全宽可以认为是中间最大反射率截面贡献的^[8]。如果探测器的像素大小大于这个理想单色光的光斑大小,则可忽略晶体厚度导致的单色光束展宽问题,该问题会降低光谱仪的实际分辨率。当像素 p 大于等于晶体厚度 t 时,可避免分辨率降

低问题。

4 结 论

圆柱面强弯曲晶体一次衍射分光的光谱仪已经在各个硬 X 射线自由电子激光装置上得到应用,但是进一步提高光谱仪的能谱分辨率对弯曲晶体的曲率提出了极为苛刻的要求,目前暂时无法达到。圆柱面强弯曲晶体二次衍射分光的能谱分辨率可以通过调整光谱仪参数实现,从而实现需要的理论分辨率。从数值计算上看,选择合适的参数可以轻易达到 2×10^5 以上的能量分辨率。在圆柱面强弯曲晶体摇摆曲线的理论值空缺下,采用已经测出来的实验参数进行了模拟计算,分析了二次衍射分光过程中的一些理论结果,对各个能量段光谱仪的物理结构进行设计,并且分析了应注意的问题以及探测器的像素选择等。

对于单发测量,一次衍射分光可以覆盖足够宽的带宽,二次衍射分光时覆盖的带宽受限于第二次反射时的带宽,是比较窄的。二次衍射分光主要立足于测量 SASE XFEL 中细锐的尖峰,通过多发扫描测量可以获得高分辨的重组光谱。然而,SASE 光谱具有随机性,光谱重组可能具有一定局限性,但可结合一次衍射分光的能谱进行综合分析。尤为重要的是,对于高度相干并且带宽很窄的 Seeding XFEL 的光谱,该二次衍射分光技术可以提供足够高的能量分辨率,对 XFEL 光源新原理与机制的研究具有深远的意义。

圆柱面强弯曲晶体二次衍射分光的理论设计提供了一定的理论基础,可为进一步开展 SHINE 装置的硬 X 射线光谱仪设计和光谱诊断提供指导。

参 考 文 献

- [1] Emma P, Bane K, Cornacchia M, et al. Femtosecond and subfemtosecond X-ray pulses from a self-amplified spontaneous-emission-based free-electron laser[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 92(7): 074801.
- [2] 赵振堂, 王东, 殷立新, 等. 上海软 X 射线自由电子激光装置[J]. *中国激光*, 2019, 46(1): 0100004. Zhao Z T, Wang D, Yin L X, et al. Shanghai soft X-ray free-electron laser facility[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(1): 0100004.
- [3] Saldin E L, Schneidmiller E A, Yurkov M V. Statistical properties of the radiation from SASE FEL operating in the linear regime [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1998, 407(1/2/3): 291-295.
- [4] 邵任之, 李宾. 基于超快动力学模型的阿秒脉冲复原方法[J]. *光学学报*, 2018, 38(9): 0932001. Shao R Z, Li B. Reconstruction method of attosecond pulses based on ultrafast dynamic model [J]. *Acta Optica Sinica*, 2018, 38(9): 0932001.
- [5] 李成名, 李宾. 基于太赫兹调制的超快 X 射线脉冲长度复原方法 [J]. *光学学报*, 2020, 40(6): 0632001. Li C M, Li B. Algorithm to reconstruct ultra-fast X-ray pulse based on terahertz modulation [J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(6): 0632001.
- [6] Wellhöfer M, Hoefft J T, Martins M, et al. Photoelectron spectroscopy as a non-invasive method to monitor SASE-FEL spectra [J]. *Journal of Instrumentation*, 2008, 3(2): P02003.
- [7] Ratner D, Abela R, Amann J, et al. Experimental demonstration of a soft X-ray self-seeded free-electron laser[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(5): 054801.
- [8] Rehanek J, Makita M, Wiegand P, et al. The hard X-ray photon single-shot spectrometer of SwissFEL: initial characterization [J]. *Journal of Instrumentation*, 2017, 12(5): P05024.
- [9] Amann J, Berg W, Blank V, et al. Demonstration of self-seeding in a hard-X-ray free-electron laser [J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(10): 693-698.
- [10] Maroju P K, Grazioli C, di Fraia M, et al. Attosecond pulse shaping using a seeded free-electron laser[J]. *Nature*, 2020, 578(7795): 386-391.
- [11] Inoue I, Osaka T, Hara T, et al. Generation of narrow-band X-ray free-electron laser via reflection self-seeding [J]. *Nature Photonics*, 2019, 13(5): 319-322.
- [12] 李卓, 李宾. 一种新型 keV 波段超高分辨光栅光谱仪设计[J]. *光学学报*, 2019, 39(8): 0822001. Li Z, Li B. Design of novel keV-range grating spectrometer with ultra-high resolving power [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(8): 0822001.
- [13] Li Z, Li B. A sagittally confined high-resolution spectrometer in the 'water window' [J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2018, 25(3): 738-747.
- [14] 王月, 李宾. 中能 X 射线自由电子激光 SASE 脉冲在 Cr/B₄C 多层膜结构上的反射特性[J]. *核技术*, 2021, 44(8): 080502. Wang Y, Li B. Investigation of SASE FEL pulse in tender X-ray range reflection from Cr/B₄C multilayer structures[J]. *Nuclear Techniques*, 2021, 44(8): 080502.
- [15] 骆钧尧, 郭智, 黄浩, 等. 多层膜光栅衍射效率的同

- 步辐射研究[J]. 光学学报, 2021, 41(14): 1405001.
- Luo J Y, Guo Z, Huang H, et al. Synchrotron radiation research on diffraction efficiency of multilayer coated grating [J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(14): 1405001.
- [16] Inubushi Y, Tono K, Togashi T, et al. Determination of the pulse duration of an X-ray free electron laser using highly resolved single-shot spectra [J]. Physical Review Letters, 2012, 109(14): 144801.
- [17] Zhu D L, Cammarata M, Feldkamp J M, et al. A single-shot transmissive spectrometer for hard X-ray free electron lasers [J]. Applied Physics Letters, 2012, 101(3): 034103.
- [18] Rich D, Zhu D L, Turner J, et al. The LCLS variable-energy hard X-ray single-shot spectrometer [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2016, 23(1): 3-9.
- [19] Boesenberg U, Samoylova L, Roth T, et al. X-ray spectrometer based on a bent diamond crystal for high repetition rate free-electron laser applications [J]. Optics Express, 2017, 25(3): 2852-2862.
- [20] Makita M, Karvinen P, Zhu D, et al. High-resolution single-shot spectral monitoring of hard X-ray free-electron laser radiation [J]. Optica, 2015, 2(10): 912-916.
- [21] David C, Seniutinas G, Makita M, et al. Spectral monitoring at SwissFEL using a high-resolution on-line hard X-ray single-shot spectrometer [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2021, 28(6): 1978-1984.
- [22] Kujala N, Freund W, Liu J, et al. Hard X-ray single-shot spectrometer at the European X-ray free-electron laser [J]. Review of Scientific Instruments, 2020, 91(10): 103101.
- [23] Samoylova L, Boesenberg U, Chumakov A I, et al. Diffraction properties of a strongly bent diamond crystal used as a dispersive spectrometer for XFEL pulses [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2019, 26(4): 1069-1072.
- [24] Als-Nielsen J, McMorrow D. Elements of modern X-ray physics [M]. New Jersey: Wiley, 2011.
- [25] Als-Nielsen J, McMorrow D. 现代 X 光物理原理 [M]. 封东来, 译. 上海: 复旦大学出版社, 2015.
- Als-Nielsen J, McMorrow D. Elements of modern X-ray physics [M]. Feng D L, Transl. Shanghai: Fudan University Press, 2015.