



· 惯性约束聚变物理与技术 ·

惯性约束聚变 X 射线晶体衍射研究及最新进展*

孙 奥¹, 尚万里¹, 杨国洪¹, 韦敏习¹, 黎 淼², 车兴森¹, 侯立飞¹, 杜华冰¹,
杨轶濛¹, 张文海¹, 杨 冬¹, 王 峰¹, 何海恩¹,
杨家敏¹, 江少恩¹, 张保汉¹, 丁永坤³

(1. 中国工程物理研究院 激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900; 2. 重庆邮电大学 光电工程学院, 重庆 400065;
3. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘 要: 介绍了惯性约束聚变研究中 X 射线线谱诊断与各物理量之间关系, 并对 X 射线晶体谱仪诊断方式及诊断原理进行了简要说明。针对不同类型诊断, 介绍了常用不同类型衍射晶体的作用与原理。此外, 介绍了最近开展的一种新型变锥面弯晶 X 射线诊断方法研究, 此方法拥有高集光效率的同时, 保证了后端接收装置的精巧耦合, 减小了像差。以变锥面弯晶衍射特性研究为出发点, 开发了一个 X 射线任意面型晶体衍射追迹仿真软件 X-Chase, 并以国内某大型激光装置类 H、类 He 线的变锥面晶体诊断为例进行了计算演示, 数值模拟结果显示了变锥面晶体具有很好的聚焦效果。

关键词: X 射线线谱; X 射线衍射; 数值模拟; 惯性约束聚变

中图分类号: O721; O41

文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202032.200129

Study on X-ray line emission diffraction in inertial confinement fusion and its recent progress

Sun Ao¹, Shang Wanli¹, Yang Guohong¹, Wei Minxi¹, Li Miao², Che Xingsen¹, Hou Lifei¹,
Du Huabing¹, Yang Yimeng¹, Zhang Wenhai¹, Yang Dong¹, Wang Feng¹, He Haien¹,
Yang Jiamin¹, Jiang Shaoen¹, Zhang Baohan¹, Ding Yongkun³

(1. Laser Fusion Research Center, CAEP, Mianyang 621900, China;

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

3. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract: This paper introduces the relationship between X-ray line emission diagnosis and various physical quantities in the study of inertial confinement fusion, and briefly explains the diagnosis method and principle of X-ray crystal spectrometer. For different types of diagnosis, it introduces the functions and principles of different commonly used types of diffraction crystals. In addition, it introduces a new type of X-ray diagnostic method of multi-cone curved crystals, which has high light collection efficiency and at the same time ensures the delicate coupling of the back-end receiving device and reduces aberrations. Based on the study of the diffraction characteristics of the multi-cone curved crystal, X-Chase, an X-ray arbitrary surface crystal diffraction tracking simulation software, was developed. At the same time, the multi-cone crystal of H and He line emissions on the SG laser facility is utilized to demonstrate the code functions. The numerical simulation results show that the variable cone crystal has a good focusing ability.

Key words: X-ray line emission; X-ray diffraction; numerical simulation; inertial confinement fusion

激光惯性约束聚变(ICF)实验中,其复杂的物理过程会通过各种途径产生 X 射线,无论是发射特征 X 射线还

* 收稿日期:2020-05-17; 修订日期:2020-07-13

基金项目:国家自然科学基金面上项目(11775203);中国工程物理研究院院长基金项目(YZJLX2016007)

作者简介:孙 奥(1995—),男,学士,研究实习员,从事 X 射线能谱诊断技术研究; sunao2013@163.com.

通信作者:韦敏习(1980—),男,硕士,副研究员,从事 X 射线能谱诊断技术研究; wmx17@sina.com;

黎 淼(1982—),男,博士,副教授,从事 X 射线及 γ 射线诊断技术研究; limiao@cqopt.edu.cn.

是吸收特征 X 射线,不同 X 射线能谱和辐射流特征会携带不同的信息。通过直接诊断携带信息的 X 射线,可以间接得到 ICF 实验中各物理量的参数,并了解反推各物质与能量相互作用的过程,所以 ICF 实验中关于 X 射线的能谱和辐射流的测量至关重要^[1]。其中,晶体谱仪是诊断 X 射线能谱最为常见的诊断设备,从 1912 年劳厄发现 X 射线的晶体衍射现象开始,关于晶体与 X 射线的研究已持续一百多年,针对 ICF 的晶体谱仪 X 射线能谱诊断也经过多次技术更新,呈现出多样化、针对性的特点。比如针对高能及超高能 X 射线,使用透射式弯晶晶体谱仪;针对超宽能谱及多段能谱测量,采用同视场多通道弯晶谱仪;针对窄能点的时间特性研究,选配高效率的 HOPG 平晶;针对单能背景光的前照成像,选用球面弯晶;针对弱信号的研究,使用柱面或锥面弯晶。最近,本课题组逐渐发展了一种新型的变锥面晶体面型,可以用于高集光效率的 X 射线能谱诊断。不同于此前多种提高集光效率的晶体面型,变锥面弯晶在保持高集光效率的同时,调制集光位置,使得晶体分光结构能够和后端 X 射线接收装置实现精巧的配合,实现靶场限制环境下的精密诊断。同时,开发了一个任意面型 X 射线追迹软件 X-Chase,基于蒙卡算法,可以用于实验模拟数值仿真,对复杂环境下的精密诊断开展有着重要意义。

1 惯性约束聚变研究中的 X 射线线谱诊断

激光惯性约束聚变点火中,短波长高功率密度激光(如间接驱动为 $I_L \approx 10^{14} \sim 10^{15} \text{ W/cm}^2$)与靶相互作用时,在临界面附近通过逆韧致吸收将能量转移给电子。一方面,获得能量的电子通过碰撞加热其他冷电子和离子,使整个冕区加热至高温并向真空膨胀;另一方面,获得能量的电子向密度大于临界密度的靶内输运并加热电子和离子,被加热的靶等离子体部分(中高 Z 靶材料)或全部(低 Z 靶材料)电离。对于中高 Z 材料的靶等离子体,除了自由电子之外,还有不同电离态离子及其产生的高温辐射。在这种高温高密度的等离子体中存在各种复杂的原子动力学过程和相关的 X 射线线谱辐射^[1]。

如电子和离子相互作用中,自由电子能量接近离子势能时,被离子俘获并辐射能量的复合辐射是等离子体中电子与离子的主要复合过程之一,其是光致电离的逆过程,辐射的能量为离子的势能,形成线谱辐射;双电子复合过程中,自由电子碰撞离子使低能态电子跃迁到高能态,并最终发射光子回到低能态。辐射与离子相互作用,离子吸收光子后跃迁至激发态,并发射光子回到基态^[2]。这些物理过程均会发射 X 光线谱,而对这些线谱的诊断可以研究上述物理过程。

诊断 X 射线线谱,目前最主流的方法是使用晶体,利用晶体的衍射选能分光的特性,对 X 射线进行精密的分光操作,在 ICF 物理实验中,X 射线线谱的晶体谱仪诊断占有十分重要的地位。而不同物理过程辐射的 X 射线线谱需要不同的晶体(种类及表面面型的改变)构成的诊断系统进行精密诊断,进一步推知激光惯性约束聚变实验相关物理信息。等离子体密度会引起原子(离子)能级劈裂(Stark 效应)而表现出谱线展宽,通过展宽诊断密度成为惯性约束聚变研究领域一种常用的密度诊断方法;此外,谱线强度比方法是通过测量等离子体发现谱中一些对密度敏感的谱线作为诊断工具,推导等离子体密度。通过光谱学的方法可以诊断等离子体温度。对于高温等离子体,一般采用发射光谱诊断;对于低温等离子体,一般采用吸收光谱作为诊断工具^[3-4]。具体的,通过普通的晶体谱仪,诊断 X 射线吸收精细结构光谱,可以得到推进层的 $\rho R(t)$;诊断吸收线/发射线,可以得到不透明度参数。通过扫描(条纹)晶体谱仪,诊断 X 射线谱线发射的时间过程,可以得到靶丸激光烧蚀速率和烧蚀速度;诊断微量元素线谱加宽和线谱强度,可以得到电子温度 $T_e(t)$ 和电子数密度 $n_e(t)$;诊断双示踪材料等离子的离子发射的共振线,可以得到电子温度 $T_e(t)$;诊断芯部发光历程,可以得到内爆峰值发射时间。通过门控晶体谱仪,诊断 X 射线 Thomson 散射,可以得到燃料绝热因子。通过 X 射线单能成像(如 MMI)系统,实现 X 射线单能成像,可以得到压缩对称性、压缩比与形状;通过空间分辨晶体谱仪,诊断示踪微量元素的发射光谱,可以得到不稳定性界面层与层之间的混合。

2 晶体分光诊断

自从 Bragg 衍射现象被发现,晶体就成为 X 射线诊断的一个重要分光工具,可用于研究等离子体温度、密度等状态参数^[5-7]。如图 1 所示,X 射线入射到晶体上,受到晶体中原子的散射。由于晶体中原子间距与 X 射线波长相近,且晶体中点阵原子呈规则、周期的排列,因而它们所散射的 X 射线

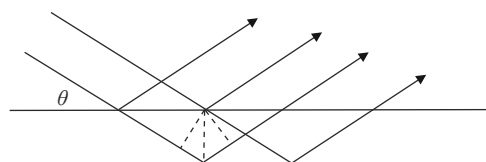


Fig. 1 Schematic diagram of crystal diffraction

图 1 晶体衍射示意图

之间具有一定的相位和光程差关系,在某一确定方向上便会产生相加的衍射,形成衍射光束,可由晶体 Bragg 定律来描述,即: $2d\sin\theta = k\lambda$ 。式中 λ 为被衍射 X 射线的波长; $k = 1, 2, 3 \dots$ 为衍射级次; θ 为入射 X 射线与平晶面间的夹角; d 为晶体的面间距。对于给定结构的晶体,不同的 θ 角对应不同的波长^[8]。

晶体是晶体谱仪最重要的组成部分,可以与其他探测设备如条纹相机、CCD 等配合使用,来适应不同的实验要求。与光栅谱仪相比,晶体谱仪结构简单、操作方便,特别是在短波长时,其谱分辨率较高,适合用于短波长 X 射线光谱测量^[1]。晶体分为反射式和透射式。在激光等离子体 X 射线谱方面,反射式晶体的 X 射线色散得到了最为广泛的应用。晶体的选取决定于被观测的 X 射线能区,对于激光惯性约束聚变实验研究中常见的 $1 \sim 10$ keV 范围,选用的晶体主要有 LiF($2d=0.2848$ nm), Si($2d=0.6271$ nm), PET($2d=0.8742$ nm), TAP($2d=2.578$ nm), RAP($2d=2.612$ nm)等。对光子能量低于 1 keV,要求选用晶格常数更大的晶体,例如硬脂酸铅晶体。对于光子能量大于 10 keV,则常用透射式晶体^[1]。

3 晶体衍射理论

3.1 平面晶体

Darwin 建立了平面晶体衍射的理论基础。理想晶体中,在不同的原子面上, X 射线经过多次反射,通过每个原子面上反射的光束叠加,在反射光束中产生干涉加强或干涉减弱。后来 Ewald 发展了更加严谨的理论。晶体被认为是 X 射线辐照形成的周期性排布的偶极子。偶极子形成的电磁波相互干涉形成衍射光束。Laue 推导了周期性排布电介质中的麦克斯韦方程组^[9]。对于理想晶体,其衍射效率可以解析计算。对于 Bragg 衍射

$$R_{\text{bragg}}(\Delta) = \frac{1}{|b|} \frac{I_H}{I_0} = \frac{1}{|b|} \left| \frac{x_1 x_2 (c_1 - c_2)}{c_2 x_2 - c_1 x_1} \right|^2 \quad (1)$$

式中: $\Delta = \theta - \theta_B$, θ 是入射角, θ_B 是布拉格角; I_H 是衍射强度; I_0 是入射强度; $b = \gamma_0 / \gamma_H$ 是不对称性因子, γ_0 和 γ_H 分别为入射和衍射方向余弦(一维理想情况下 $\gamma_0 = \cos\theta$ 和 $\gamma_H = \cos\theta_B$, $b = 1$); $c_1 = \exp(-i\phi_1 t)$, $c_2 = \exp(-i\phi_2 t)$, t 为晶体厚度, $\phi_1 = 2\pi k \delta'_0 / \gamma_0$, $\phi_2 = 2\pi k \delta''_0 / \gamma_0$, $(\delta'_0, \delta''_0) = 0.5(\Psi_0 - z \pm \sqrt{qP^2 + z^2})$, Ψ_0 是电极化率, $z = (1-b)/2\Psi_0 + b/2\tau$, $\tau = 2\Delta \sin(2\theta_B)$, $q = b\Psi_H \Psi_H^*$, Ψ_H 为 Ψ_0 的傅里叶分量, Ψ_H^* 为 Ψ_H 的共轭复数, P 是极化因子, $k = 2\pi/\lambda$ 是波数; $(x_1, x_2) = (-z \pm \sqrt{qP^2 + z^2}) / P\Psi_H$ 。

3.2 曲面晶体

平面晶体测谱范围、光谱分辨率、光谱强度等受其衍射特性和光路几何结构限制,很难进一步地提高。于是科学家们将晶体进行弯曲,增加其布拉格衍射角范围或使其具有聚焦特性,以扩大其测谱范围、提高光谱分辨率和光谱强度。当晶体弯曲之后, X 射线入射角会发生色散(入射角度并不唯一),需要通过光线追踪的方法进行计算,在实验中通过准直的办法进行约束使得角色散可忽略^[10-11]。此外,晶体曲率半径足够小时,晶体结晶原子面面临扭曲,局部区域反射率急剧变化,表面张力使得原子面出现缺陷,细小的缺陷造成不能理解的能谱及空间发散展宽。而且原子面扭曲之后会改变其间距,影响衍射和干涉关系。Whiter 等人提出了多层理论,将晶体在穿透深度方向看作是很多层,每层均是理想晶体,因此衍射和透射通过平面晶体的动力学理论来计算。不同层失谐排列使满足柱面晶体排列。引入一个参数——角度因子 y_0 , 它表示与入射角的偏差, y_0 与穿透深度有关,在最表面时

$$y_0 = \frac{z}{\sqrt{|b|P|\Psi_H|}} = \frac{(1-b)/2\Psi_0 + b/2\tau}{\sqrt{|b|P|\Psi_H|}} \quad (2)$$

式中: z , τ 以及其他参数与公式(1)中一样。对于柱形晶体,曲率半径 ρ , 有 $y = y_0 + cA$, A 表达式如下

$$A = \frac{\pi P |\Psi_H|}{\lambda \sqrt{|\sin(\theta_B - \alpha) \sin(\theta_B + \alpha)|}} t \quad (3)$$

其中 α 是不对称性因子,系数 c 为

$$c = \frac{\sin(\theta_B - \alpha)(b-1)}{\pi |\Psi_H|^2 b \rho} \left[1 + b(1+\nu) \sin^2(\theta_B + \alpha) \right] \quad (4)$$

式中: ν 是材料泊松比。总的反射率通过不同层总量给出

$$R = \sum_{j=1}^n r_j \left(\prod_{k=0}^{j-1} t_k \exp(-\mu S_k) \right) \quad (5)$$

式中: S_k 是第 k 层中的 X 射线路径; μ 是吸收系数; r_i, t_i 分别是第 i 层的反射率和透射率, 反射率 r_i 从式(1)中得到, 透射率 t_i 也由公式计算。随着曲率半径增加, 层需要分得更细更薄。

3.3 Takagi-Taupin 方程

Takagi-Taupin 方程描述了电磁波在晶体里的传播行为, 包括衍射和透射, 并且使用于理想和非理想晶体。求解该方程可以得到衍射效率和透射效率。其解析解仅仅在特殊情况下采用, 比如 Laue(Riemann) 和 Bragg(Green) 几何条件。很多科学家开展了 TT 方程的数值模拟, 解析结果显示更加符合实际情况, 但是计算方法比较繁复, 不适用于晶体谱仪诊断研究。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial s_0} D_0(\mathbf{r}) = -i\pi k P \Psi_H D_H(\mathbf{r}) \\ \frac{\partial}{\partial s_H} D_H(\mathbf{r}) = -i\pi k P \Psi_H D_0(\mathbf{r}) + 2i\pi \left\{ k\beta_H - \frac{\partial}{\partial s_H} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})) \right\} D_H(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (6)$$

式中: $D_H(\mathbf{r})$ 和 $D_0(\mathbf{r})$ 是衍射和透射场; \mathbf{h} 是晶格向量倒易函数, 代表了晶格面阵等信息, 边界条件加于 Γ_i 面上, 需要通过有限元办法数值求解^[11]。

3.4 马赛克晶体

马赛克晶体是由 Darwin 最先提出的概念, 后经过验证确实存在。它与理想晶体的区别主要在于马赛克晶体的内部结构是很多小嵌块镶嵌在一起, 每个小嵌块之间存在间隙与方向偏差, 但是整体呈现方向性, 而理想晶体内部是理想排列的晶格。与理想晶体相比, 马赛克晶体扭摆曲线更宽更低, 虽然峰值效率较低, 但是积分衍射效率更高。石墨马赛克晶体、铍马赛克晶体在第三代同步辐射上可作为单能或准单能分光元件, 尤其是石墨马赛克晶体效率很高。马赛克晶体中微晶随机分布效果可以通过蒙卡的办法进行描述。马赛克晶体被认为是很多小块的理想晶格组成, 定向排列, 但是并非相互平行, 认为一个晶格里有序排列, 但是不同晶格中并不一致。晶格间距大于 X 射线的相干尺度, 马赛克晶体可看做一系列不相关的散射晶体, 整体散射效果可以进行卷积。散射面由其法线决定, 不同晶格法线的分布满足高斯分布, 且有标准差(如石墨标准差为 $0.1 \sim 0.5^\circ$)。在平行于入射面上, 马赛克晶体使得在不同理想晶格面上入射的光线, 汇聚于一点。在垂直于入射面上, 马赛克晶体使得本应入射到某点的光线偏离。这叫做马赛克晶体的聚焦和离焦效应^[12-13]。

假设所有晶格发射分布呈高斯分布, 其标准偏差为马赛克展宽 κ : $\omega(\Delta) = (\kappa \sqrt{2\pi})^{-1} \exp(-\Delta^2/2\kappa^2)$ 。因此入射的 X 射线可以认为是一组圆锥状的发射线。选择一条发射线, 满足随机分布, 并计算其强度。计算每条光线的强度衰减, 马赛克晶体可以采用统计的方法, 考虑晶格所有可能的方向反射率的积分。进行如下假设: (1) 晶体上下表面平行, 而且平行于晶格的平均方向; (2) 马赛克(或者马赛克标准偏差 κ) 必须比理想晶体的扭摆曲线宽; (3) X 射线波长比晶格尺寸小得多; (4) 忽略主要吸收, 意味着晶格尺度远小于主要吸收引发的衰减长度 $t_{\text{ext}} = v_0/2dF_x$, d 是晶格面之间的距离。则考虑了马赛克展宽后的衍射强度为

$$r(\Delta) = \frac{a}{1+a+\sqrt{1+2a\coth(A\sqrt{1+2a})}} \quad (7)$$

式中: $a = \frac{\omega(\Delta) Q_{s,p}}{\mu}$; $Q_{s,p} = \frac{(F_x/v_0)^2 \lambda^3}{\sin 2\theta}$; v_0 是单位体积元; F_x 为 Debye-Waller 因子。

4 常见的 Bragg 衍射晶体

晶体的面型通常以平面为主, 为增强谱仪的某些能力, 如增加测谱范围、谱分辨、谱线亮度等, 可将晶体制成凹(球、柱)面、凸(柱)面、椭圆柱面、锥面等^[1]。

基于平面晶体的谱仪操作方便, 性价比高, 特别在短波长时, 其有较好的谱分辨率, 且用任何晶体材料都可以当作分光晶体使用, 适合用于短波长 X 射线光谱测量。因此, 平面晶体谱仪已广泛地用研究等离子体 X 射线辐射。平面晶体谱仪的工作波长范围一般不大, 发光源与分光晶体的间隔近。当发光源到分光晶体的距离较近时, 激光与固体靶相互作用产生大量的溅射物质容易损坏分光晶体。经平面晶体衍射的光线又是发散的, 适用于 X 射线胶片作为记录介质。由于 X 射线胶片灵敏度低、光源大小影响谱仪的谱分辨率, 使一些对诊断十分重要的伴线、互组合线、共振线及其谱线形状不易分辨, 给等离子体的参数诊断工作带来了很大的困难, 影响了对其中物理过程的深入了解和研究。科研工作者在平面晶体谱仪上已经做了大量的改进研究工作, 尽管如此, 这些工作始终没有解决平面晶体谱仪不能够有宽的工作谱范围、高的谱分辨能力、较好的集光效率、长的工作距离和在线实

时处理 X 射线谱等问题,尤其是工作距离与谱仪的谱强度间存在明显矛盾的问题。通常情况下,工作距离越大,谱分辨能力越强,谱分辨越高;但是距离变大,导致信号强度变弱^[14]。

凸面弯晶主要是为了解决谱仪的工作距离与谱仪的谱分辨能力间的矛盾问题。凸面晶体谱仪可分为反射式和透射式两种^[1]。凸面反射式晶体谱仪结构示意图如图 2 所示。图中 r 为光源的横向尺寸, R 为弯曲晶体半径。由于谱仪线色散与凸面晶体到探测器的距离成反比,谱分辨率与凸面晶体到发光源的距离成正比,因此凸面晶体解决了谱仪的高分辨率、长的工作距离和高信噪比间的矛盾问题。为了在凸面晶体谱仪中达到最大的记录范围,必须要把晶体弯曲成 90° 角,但晶体长度一般在 $40\sim 60\text{ mm}$ 范围,所以弯曲半径的工艺要达到 $R\leq 40\text{ mm}$,加工成型有一定的难度。凸面反射式晶体谱的集光本领远不如平面晶体谱仪,谱仪集光效率低。工作谱的范围窄,经晶体衍射的光是发散的,所以不太适合与新一代探测器(如 MCP, PDA, CCD, 条纹相机和光阴极等)连接,一般只能用 X 射线胶片作为记录介质等。

高集光效率是谱仪研制追求的另一重要目标。凹面弯曲晶体能使以布拉格角射入晶体的单能光束经过反射后汇聚起来,衍射光强可比平面晶体强很多,因而凹面弯曲晶体可实现高集光效率。凹面弯曲晶体有好几种形式,除了传统的 Johann 型晶体谱仪^[15]、Johansson 型晶体谱仪^[16]和 Von Hamos 型晶体谱仪^[17]三种聚焦型弯曲晶体外,还有诸如 Hall 晶体^[18]等。

Johann 型晶体谱仪示意图如图 3 所示。在 Johann 型弯曲晶体中,平面晶体被弯曲成曲率半径为 R 的柱面,它的圆弧中心点与半径为 $R/2$ 的圆相切,该圆称为聚焦圆,也就是罗兰圆。位于圆上的点光源发出的光经晶体衍射后,将汇聚在圆周的对称点上,若扩展性面光源位于圆上,则圆周上的不同像点,对应不同波长的单色光。这种结构的弯曲晶体谱仪只有在入射角 $\theta=90^\circ$ 时,才有最佳的聚焦,而当 θ 较小时,其聚焦作用较差,所得到的衍射峰不甚尖锐,对于点光源,只能做单色测量,仅为单色谱仪。另外, Johann 型晶体谱仪除有高集光本领和高谱分辨外,它还容易实现诊断谱的时间分辨(即使时间分辨也有较好的信噪比)。但成像焦点是曲面,不利于谱仪与新一代探测器(如 MCP, PDA, CCD, 条纹相机和光阴极等)连接。对于点光源,谱仪只能做单色测量,仅为单色谱仪,并且几何像差严重。另外,在 Johann 型弯曲晶体谱仪组成的测量与诊断系统中,发光源、分光晶体和探测器必须放在罗兰圆上,因而缺乏灵活性^[15]。

实质上, Johansson 型弯曲晶体谱仪与 Johann 结构形式是相同的,如图 4 所示,只是为了满足聚焦条件,把平面晶体弯曲成曲率半径为 R 的柱面晶体的内表面,再研磨成曲率半径为 $R/2$ 的表面,因而 Johansson 型弯曲晶体谱仪的聚焦性能比 Johann 结构的聚焦性能要好,可消除几何像差,从而得到了广泛的应用。与 Johann 型晶体谱仪比较, Johansson 型晶体谱仪有本质的改进是消除了几何像差。但仅适应于大角衍射测量,也就是说,只有当入射角 $\theta=90^\circ$ 时,才能达到最佳的聚焦效果^[16]。

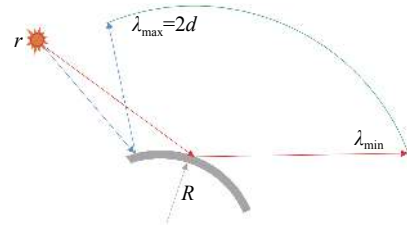


Fig. 2 Schematic diagram of convex crystal

图 2 凸面晶体示意图

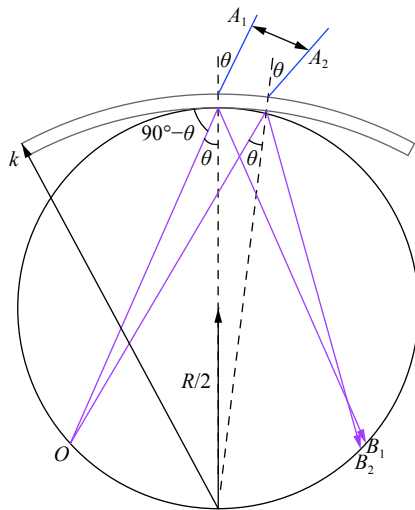


Fig. 3 Schematic diagram of Johann crystal

图 3 Johann 晶体示意图

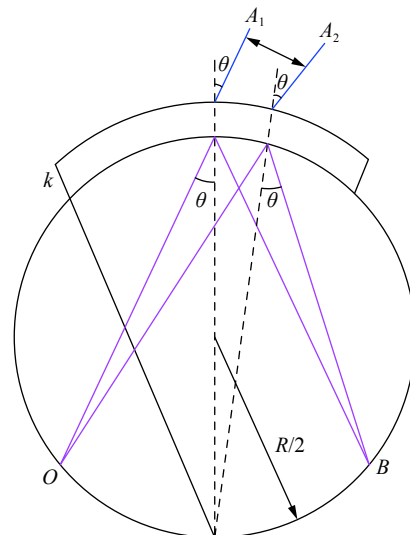


Fig. 4 Schematic diagram of Johansson crystal

图 4 Johansson 晶体示意图

Von Hamos 型弯曲晶体谱仪结构如图 5 所示。在 Von Hamos 型弯曲晶体谱仪中, 将晶体的衍射面弯曲成圆柱面, X 射线源和探测器位于圆柱的轴上。德国研制的 Von Hamos 型锥面型弯曲晶体谱仪, 晶体可沿对称轴移动来改变探测器上的 X 射线色散和光通量密度, 且成像面与谱线衍射面垂直。经 Von Hamos 型弯曲晶体衍射出来的相同波长的 X 射线都聚焦在圆柱轴上成一个像点, 所以谱仪有高集光效率, 且强度可调。谱仪的测量范围可达到 0.1 nm, 理论上的谱分辨能力可达 1×10^3 以上。尤其是 Von Hamos 型锥面型弯曲晶体谱仪能顺当地与 CCD 或条纹相机配接, 用于 X 射线的时间积分和时间分辨测量。但发光源和探测器必须位于圆柱的轴上, 缺乏灵活性, 工作距离短, 并且存在严重像差、实测谱分辨率不高等问题^[17]。

Hall 晶体可以将多个能点的 X 射线光谱聚焦在中心轴线上, 能带宽度随晶体长度增加而增大; 同时投射到锥面上的所有谱线都能够被聚焦, 谱线收集效率很高, 能够在提高衍射效率的同时而不降低光谱分辨力, 因此该结构在高温等离子体诊断中得到比较广泛的研究。然而锥面晶体检测系统有其明显的缺点, 即谱仪的探测面位置必须位于圆锥面上, 以具备旋转对称性, 从而保证所有谱线能够在探测面聚焦。带来的不利之处是光谱仪本身设计困难, 而且光谱仪结构非直线布局, 视场角要求很大, 靶室体积有限, 必然会影响其它法兰窗口的诊断设备^[18]。Hall 晶体几何光路见图 6。

5 一种新型的 Bragg 衍射晶体

美国普林斯顿大学的 M. Bitter 在 2016 年提出变锥晶体谱仪的概念, 该谱仪的优点是在具有锥面晶体宽频谱范围、强聚焦能量、高光谱分辨力特点的基础上, 可将多个能点的 X 射线光谱聚焦于与中心轴线垂直的直线位置, 使条纹相机的检测光路与锥面的检测光路一致, 可以使探测谱仪的整体光路保持在中心轴线方向, 谱仪结构呈直线布局。如图 7 所示, 变锥面弯曲晶体横向布置, 检测面竖直放置, 由点源辐射的 X 射线经弯曲晶体衍射后, 依据不同的布拉格角(图中描述了三种情况), 分别在同一直线上的 f_A , f_B , f_C 处聚焦。变锥面晶体具有极高的集光效率, 理论上曲面晶体表面所有入射 X 射线都会被聚焦在检测面上, 因此相对于平面晶体在收光强度方面具有明显的优势, 同时该结构又能够检测宽频谱范围的 X 射线, 且可以与条纹相机很好地耦合^[19-20]。

目前国际上关于变锥面晶体仅有理论设计, 并未应用于 X 射线线谱诊断实验。2019 年 5 月, 在神光 III 原型激光装置上, 本课题组开展了基于变锥面的 X 射线线谱诊断实验研究, 采用 Ti 平面靶开展了变锥面晶体高衍射效率验证实验, 观测到 Ti 的类 H 线谱衍射信号强度比同种类材料平面晶体强 126 倍(未发表)。

6 任意面型 Bragg 晶体衍射数值模拟程序 X-Chase

X-Chase 程序(逐光)基于欧洲同步辐射中心开发的 Shadow 程序^[21], 对各种光源发射的 X 射线在分光元件(晶体、透射光栅、反射光栅、多层镜、金属反射镜等)中的干涉和衍射行为进行计算, 得到 X 射线在空间的传播轨迹, 并在记录面上展示 X 射线的空间、能谱、强度等信息。除了衍射元件外, X-Chase 还可以设置其他常用光学元件, 如滤片、光阑等。采用蒙特卡罗方法对特定能量范围 X 射线空间、角度、能量分布来建立 X 射线源。每一条从源发射的射线都实现光线追踪计算, 追迹过程包括晶体元件组成的光学系统。通过对计算数据的后处理(射线轨迹

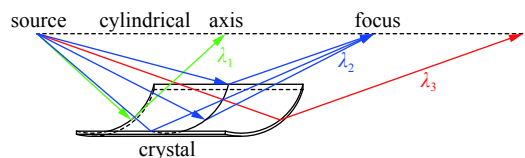


Fig. 5 Schematic diagram of Von Hamos crystal

图 5 Von Hamos 晶体示意图

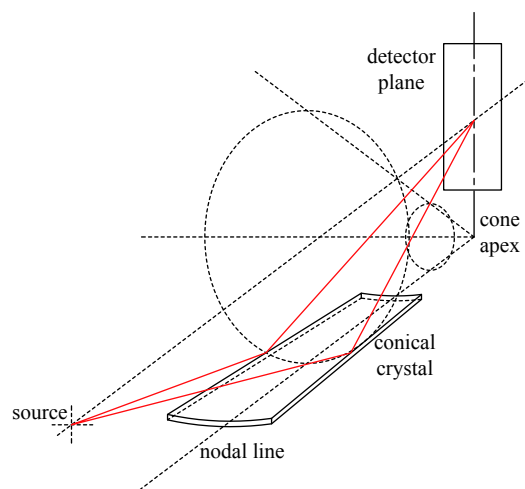


Fig. 6 Schematic diagram of Hall crystal

图 6 Hall 晶体示意图

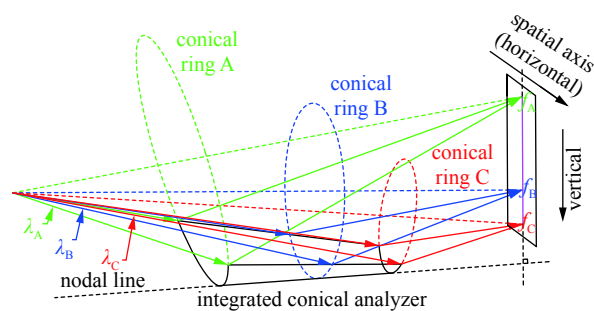


Fig. 7 X-ray diffraction path of multi-cone curved crystal

图 7 变锥面弯曲晶体衍射 X 射线光路

直方图、强度积分、射线焦斑可视化处理), 计算出光束界面、能量分辨率、强度分布、空间分布等重要信息。其主要流程见图 8。

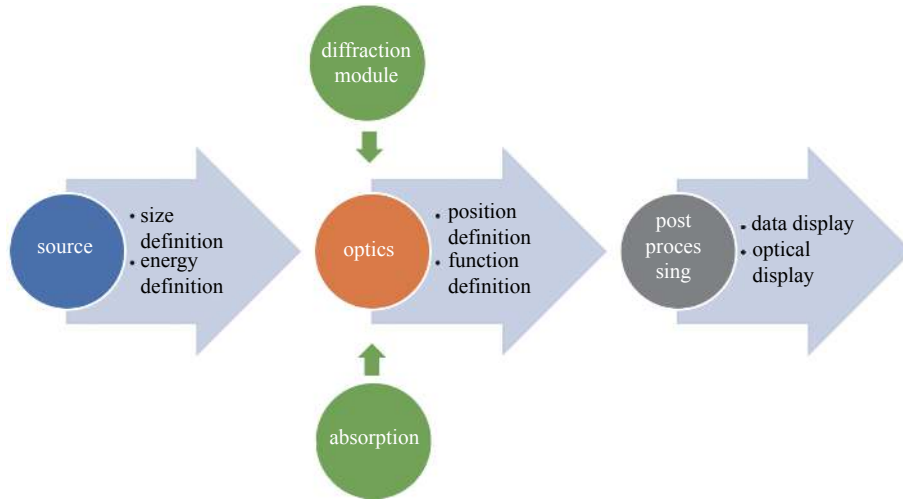


Fig. 8 Main process of X-Chase

图 8 X-Chase 程序主要流程

对于完美晶体衍射, 首先是利用射线追迹算法根据晶体衍射系统几何关系计算射线在传输过程中的方向变化; 其次是根据发生在晶体内部的衍射现象, 建立衍射物理模型。在计算过程中所涉及的几何模型和物理模型针对入射的单能射线, 而且应用于光束中的每一条射线。在程序处理非单能点光源时, 射线束由多条不同波长和强度的射线组合而成, 每条射线独立进行计算。

当晶体存在弯曲变形时, 一般动力学衍射理论计算无法正确预测晶体衍射计算, 如柱面弯曲晶体 Bragg 衍射分析, 是在 Zachariasen 提出的衍射计算公式基础上实现 Multi-layer 近似计算, 而对于弯曲晶体 Laue 衍射分析, 则需要采用 Penning-Polder 近似计算方法^[9-10]。

对于任意面型形变条件下的 X 射线晶体衍射计算, 其本质是通过计算 X 射线在晶体内部电磁场传播来获得相应的衍射分布, 这一求解过程可以通过推导周期性形变介质中的麦克斯韦方程来实现, 即 Takagi-Taupin 方程。本项目拟通过求解 Takagi-Taupin 方程获得 X 射线反射曲线、空间衍射强度分布等弯曲晶体的衍射特性, 从而对任意面型完美晶体及畸变晶体展开 X 射线动力学相关问题分析。

此外, 当晶体是完美弯曲晶体时, 相对于晶体平面的衍射光束会进行修正, 主要原因是弯曲衍射晶体晶格结构会使射线入射角在晶体表面沿着光束轨迹产生一定角偏转, 这种角度分布会改变总衍射强度。这种效应通过射线追踪方法来进行分析。当晶体曲率半径足够小时, 晶体的晶格原子面存在严重的扭曲, 过度弯曲造成的机械应力会使原子面失配, 宏观上造成衍射分布的扭曲, 即晶体表面上任意一点的局部反射率会存在剧烈变化。本程序中假设弯曲晶体的曲率相对于平面晶体而言, 不会造成衍射分布的扭曲, 通过 Takagi-Taupin 方程进行求解。Takagi-Taupin 方程探讨了畸变晶体的衍射动力学理论, 将晶体内波场看做传输波场和衍射波场, 导出一组具有普适性的耦合偏微分方程组, 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^[9-13]。

程序使用过程中, 需要完成源参数设置。源可设置为点光源、面光源、体光源, 可设置光源面向衍射源器件的二维发散角, 面光源的面型(矩形、椭圆、高斯型)。光源光线追踪的光线数量、波长、不同波长相对强度、偏振态等可设定。传输路径空间介质设定, 基于入射光子能量, 获得特征谱线入射 Bragg 角, 根据指定材料摇摆曲线 FWHM 角度范围确定反射角度范围。根据所设计谱仪几何关系, 在设计聚焦面设置射线光路截止坐标。典型的程序仿真流程图如图 9 所示。

7 变锥面算例

下面以国内某大型激光装置上, 面向 Ti 的类 H、类 He 线变锥面晶体衍射为例子, 采用 X-Chase 程序进行计算演示。物距和像距均为 141.7 mm, 晶体采用 α 石英晶体, 晶面 (2, 0, 0), $2d=0.425$ nm。变锥面 3D 图像见图 10, 其 S 极化和 P 极化扭摆曲线如图 11 所示, 同种类晶体平面晶体和变锥面晶体衍射效果图见图 12。变锥面实现了类 H、类 He 线谱聚焦(1.2 cm 聚焦为 $5 \mu\text{m}$), 变锥面绝对强度提升 166 倍。该算例很好地展示了变锥面晶体的聚焦功能。

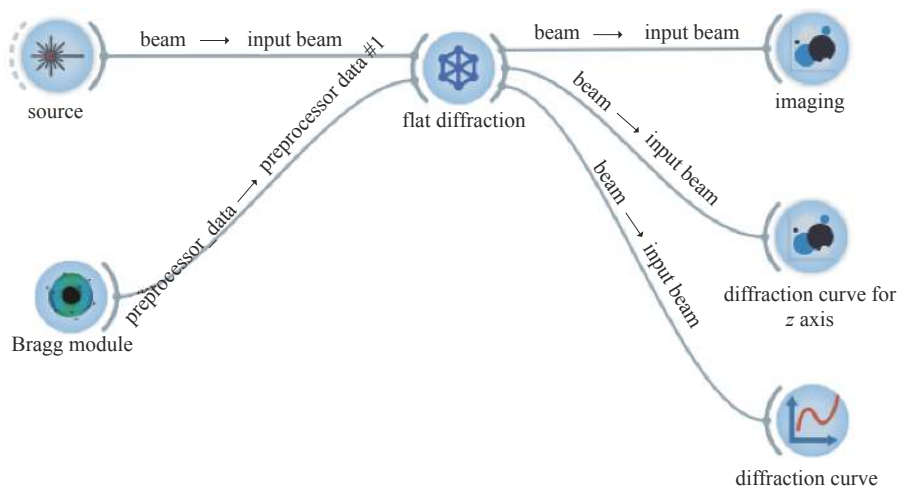


Fig. 9 Simulation process of X-Chase

图 9 X-Chase 仿真流程图

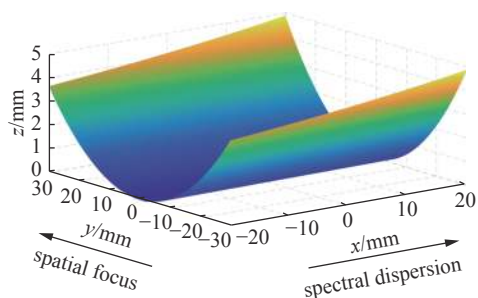


Fig. 10 Multi-cone crystal surface image

图 10 变锥面弯晶图像

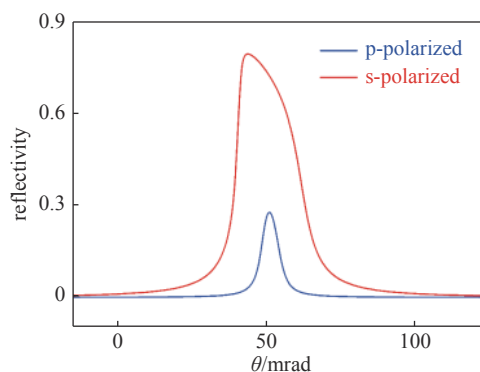


Fig. 11 Reflectivity of alpha quartz crystal

图 11 α 石英晶体反射效率

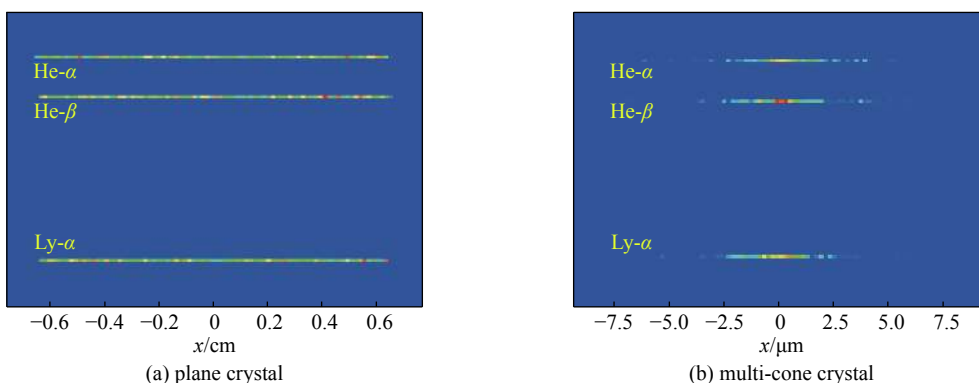


Fig. 12 Simulated diffraction imaging of plane crystal and multi-cone crystal

图 12 平面晶体和变锥面晶体衍射效果图

8 结 论

本文简单介绍了惯性约束聚变领域 X 射线线谱辐射物理过程, X 射线线谱诊断在惯性约束聚变实验研究中的应用, 平面晶体、曲面晶体等衍射理论, 介绍了常见的 Bragg 衍射晶体和一种新型的变锥面晶体。对这种新型的变锥面晶体进行了实际的研制与应用, 在实验中对 Ti 的类 H 谱线进行测量, 得到相对于同种材料平面晶体 126 倍的谱线强度。开发了一个基于 Shadow 程序内核的任意面型 X 射线衍射程序 X-Chase, 该程序拥有可视化的交互界面, 友好的操作流程, 能够对 X 射线与复杂晶体的衍射作用进行数值模拟, 通过蒙特卡洛算法和射线追迹的使用, 得到与真实情况符合程度较高的结果, 对 X 射线晶体诊断的应用具有很好的指导作用。以面向国内某大型激光装置

的变锥面晶体为例进行了算例演示,模拟结果展示了变锥面晶体很好的聚焦性能,相对平晶提高了 166 倍的谱线强度,同时验证了程序的功能。

参考文献:

- [1] 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: 200-205. (Wen Shuhuai, Ding Yongkun. Laser inertial confinement fusion diagnostics[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012: 200-205)
- [2] Basov N G, Danilychev V A, Glotov E P. Theoretical investigation of promising methods of improving the energy characteristics of CW industrial electron-beam-controlled lasers[J]. *Journal of Soviet Laser Research*, 1984, 5: 647-666.
- [3] Nuckolls J, Wood L, Thiessen A, et al. Laser compression of matter to super-high densities: Thermonuclear (CTR) applications[J]. *Nature*, 1972, 239(5368): 139-142.
- [4] Lindl J D, Amendt P, Berger R L, et al. The physics basis for ignition using indirect-drive targets on the National Ignition Facility[J]. *Physics of Plasmas*, 2004, 11(2): 339-491.
- [5] Champeney D C, Fuoss R M. Fourier transforms and their physical applications[J]. *Physics Today*, 1973, 26(10): 57.
- [6] James R W. The dynamical theory of X-ray diffraction[J]. *Solid State Physics*, 1963, 15: 53-220.
- [7] Wittry D B, Barbi N C. X-ray crystal spectrometers and monochromators in microanalysis[J]. *Microscopy and Microanalysis*, 2001, 7(2): 124-141.
- [8] Nielsen J A, McMorro D. Elements of modern X-ray physics[M]. London: John Wiley & Sons, 2011: 207-230.
- [9] Sanchez del Rio M, Bernstorff S, Savoia A, et al. A conceptual model for ray tracing calculations with mosaic crystals[J]. *Review of Scientific Instrument*, 1992, 63: 932-935.
- [10] Gambaccini M, Taibi A, Del Guerra A, et al. Small-field imaging properties of narrow energy band X-ray beams for mammography[C]// IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Record. 1995, 3: 1388-1391.
- [11] Sanchez del Rio M, Ferrero C, Mocella V. Computer simulation of bent perfect crystal diffraction profiles[C]//Proc of SPIE. 1997, 3151: 312-323.
- [12] Honkanen A P, Ferrero C, Guigayb J P, et al. A finite-element approach to dynamical diffraction problems in reflection geometry[J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2018, 51: 514-525.
- [13] Freund A K. Mosaic crystals monochromators for synchrotron radiation instrumentation[J]. *Nucl Instr and Met*, 1988, A266: 461-466.
- [14] Koppel L N. Active-recording X-ray crystal spectrometer for laser-induced plasmas[J]. *Review of Scientific Instrument*, 1976, 47: 1109-1112.
- [15] Barnsley R, Peacock N J, Dunn J, et al. Versatile high resolution crystal spectrometer with X-ray charge coupled device detector[J]. *Review of Scientific Instrument*, 2003, 74: 2388-2397.
- [16] Johansson T. A novel precise focusing X-ray Spectrometer[J]. *Journal of Physics*, 1993, 82(7/8): 507-528.
- [17] Yaakobi B, Turner R E, Schnopper H W, et al. Focusing X-ray spectrograph for laser fusion experiments[J]. *Review of Scientific Instrument*, 1979, 50: 1609-1611.
- [18] Hall T A. A focusing X-ray crystal spectrograph[J]. *Journal of Physics E Scientific Instruments*, 2000, 17(2): 110.
- [19] Morishita K, Hayashi K, Nakajima K. One-shot spectrometer for several elements using an integrated conical crystal analyzer[J]. *Review of Scientific Instrument*, 2012, 83: 013112.
- [20] Bitter M, Hill K W, Gao L, et al. A multi-cone X-ray imaging Bragg crystal spectrometer[J]. *Review of Scientific Instrument*, 2016, 87: 11E333.
- [21] Del Rio M S, Dejus R J. XOP v2. 4: Recent developments of the X-ray optics software toolkit[C]//Proc of SPIE. 2011: 814115.