

Johann 单色器能量分辨率分析

肖向辉 刘鹏

(中国科学院高能物理研究所 北京 100039)

摘要 Johann 单色器是一种广泛应用的 X 光单色器,对其能量分辨率已有若干工作进行过分析.对此问题进行了进一步的分析,改进了已有的工作.将计算结果和已有公式的计算结果同时与 SHADOW 追迹结果进行比较,理论计算与追迹结果有更好地吻合,同时适用范围更大.

关键词 同步辐射 单色器 光路追迹

1 引言

X 射线是在原子水平上研究物质各种性质的有力工具.同步辐射和 X 光机是两种最常用的 X 射线光源,但都不是单色光源;对大部分 X 光实验,对入射 X 射线的能量带宽都有一定的要求,这就需要用单色器从中取出具有一定带宽的所需能量的光.对不同能区的 X 射线,所需的单色器是不同的;一般软 X 光用光栅或多层膜单色器,而硬 X 光用晶体单色器.

Johann 单色器^[1]是硬 X 光区常用的一种单色器.这种单色器可同时完成入射光的单色化和聚焦功能.但这种单色器具有一定的面形,为得到较高的能量分辨率和较小的聚焦光斑必须工作在一定的几何条件下.如果实验中偏离了合适的几何条件,出射光的能量分辨率和聚焦效果将受到影响.某些作者曾给出 Johann 单色器在一些特定几何条件下的能量分辨率估计公式,但这些公式的适用范围有限.本文将对 Johann 单色器能量分辨率作理论上的分析,并将其与 SHADOW 光路追迹程序的模拟结果作比较.

2 理论分析

2.1 单色器的能量分辨率

如果入射光是连续谱,可由布拉格公式 $2d\sin\theta_B = \lambda$

得到入射光角发散与出射光能量带宽之间关系:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \Delta\theta_B \cdot \cot\theta_B. \quad (1)$$

式中 d 是衍射面的面间距, θ_B 是 Bragg 角, $\Delta\lambda$ 是出射光带宽, λ 是入射光波长.从式(1)知道,在评价单色器能量带宽时,对于一个确定的能量和一种确定的晶体(因而确定的 θ_B),能量带宽与入射角宽度是等价的.

2.2 影响 Johann 单色器能量分辨率的几何因素

Johann 单色器是由平晶压弯成半径为 R 的弯晶.如图 1 所示,对一个柱面弯曲的晶体,从一点光源 S 发出的光入射到其表面各点处的入射角是不相等的,入射到柱面任一位置 Q 处的入射角 $\theta'_B + \gamma$ 与入射到柱面中心 O 处入射角 $\theta_B + \gamma$ 之间存在关系:

$$\cos(\theta'_B + \gamma) = \cos(\theta_B + \gamma - \phi) - \frac{p}{R} \sin\phi. \quad (2)$$

式中 θ_B 和 θ'_B 分别是 O 点与 Q 点处入射光 Bragg 角, γ 是晶体斜切角, ϕ 是 Q 点与 O 点入射光夹角,

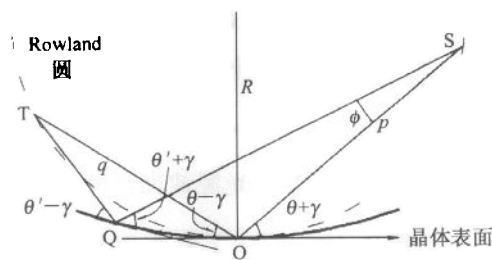


图 1 Guinier 条件计算图

p 是单色器与光源之间距离, R 是晶体曲率半径.

由式(2)可得 $\theta'_B + \gamma$ 和 $\theta_B + \gamma$ 之间差角为

$$\Delta\theta_B = (\theta'_B + \gamma) - (\theta_B + \gamma) = \frac{1}{\sin(\theta_B + \gamma)} \left[2\cos(\theta_B + \gamma) \cdot \sin^2 \frac{\phi}{2} + \frac{p}{R} \sin\phi - \sin(\theta_B + \gamma) \sin\phi \right]. \quad (3)$$

如果能使式(3)中

$$\frac{p}{R} - \sin(\theta_B + \gamma) = 0, \quad (4)$$

则

$$\Delta\theta_B = 2\cot(\theta_B + \gamma) \cdot \sin^2 \frac{\phi}{2}, \quad (5)$$

这时 $\Delta\theta_B$ 只是入射光半发散角的二次小量. 由于实验中入射光发散角在毫弧度量级, 因此 $\Delta\theta_B$ 在微弧度量级, 比通常情况下硅晶体角接受宽度小一个量级, 这时的能量分辨率近似由晶体角接受宽度决定. 由于这一项是本征的, 以下分析中我们将忽略晶体角接受宽度对能量分辨率的贡献.

从图 1 可以看到, 当物与像处在半径为 $R/2$ 的 Rowland 圆上时, 式(4)将自动满足. 由式(4)及聚焦条件^[2]

$$\frac{\sin^2(\theta_B + \gamma)}{p} + \frac{\sin^2(\theta_B - \gamma)}{q} = \frac{\sin(\theta_B + \gamma) + \sin(\theta_B - \gamma)}{R}, \quad (6)$$

可得 Guinier 条件^[3,4]

$$\frac{\sin(\theta_B + \gamma)}{p} = \frac{\sin(\theta_B - \gamma)}{q}. \quad (7)$$

Guinier 条件是针对点光源得到的. 实际应用中, 由于光源不可能是点光源, 同时光源往往有一定的深度或者光源实际物距有一定偏差, 造成 Guinier 条件不能在光源上各点同时被满足, 因此系统的能量分辨率要比由晶体角接受宽度决定的能量分辨率要差. 将式(2)对 $(\theta_B + \gamma)$ 和 p 求全微分, 可以得到入射角偏差与以上两参数偏差的关系

$$\Delta\theta_B = \Delta(\theta_B + \gamma) + \frac{\Delta p}{p} \phi, \quad (8)$$

式中 $\Delta(\theta_B + \gamma)$ 代表了由光源截面尺寸因而光源引起的入射角偏差, $\frac{\Delta p}{p} \phi$ 代表了物距偏差造成的沿某方向入射的光到单色器上入射角偏差. 在对能量分辨率进行估计时, 一般只计入光源尺寸影响, 即只考

虑(8)式中第一项, 以下称这种估计为能量分辨率的理想估计; 当光源深度或物距偏差比较大时, (8)式中第二项则应加以考虑.

对一个有尺寸、有深度的光源, Johann 单色器的能量分辨率是各个单独光源点对带宽贡献的叠加. 要估计系统能量分辨率, 就要得到出射光的能量-强度分布. 由于能量与角度是等价的, 下面将分析在表达上更方便的 $\Delta\theta_B$ -强度分布. 图 2 给出了有截面尺寸和深度的光源几何, 由图中所示几何关系, 式(8)可写为

$$\Delta\theta_B = \frac{x}{p+y} + \frac{y}{p} \phi. \quad (9)$$

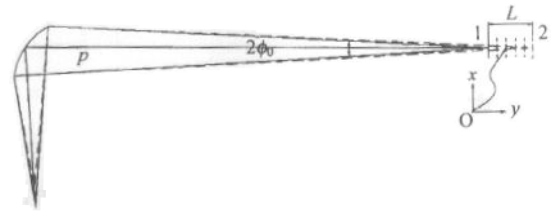


图 2 有尺寸和深度的光源

式(9)的物理意义是, 从光源上某点 (x, y) 发出的所有入射光中, 只有沿某一方向角 ϕ 的光才对 $\theta_B + \Delta\theta_B$ 所对应的能量出射光强度有贡献. 由于 $\phi \in [-\phi_0, \phi_0]$, 所以由式(9)知道只有 $x \in [(p+y)(\Delta\theta - y\phi_0/p), (p+y)(\Delta\theta + y\phi_0/p)]$ 的光源点才对 Bragg 角为 $\theta_B + \Delta\theta_B$ 的出射光有贡献. 出射光强度关于 $\Delta\theta_B$ 的分布可表达

$$F(\Delta\theta_B) = \int_A^B dy \int_{(p+y)(\Delta\theta - y\phi_0/p)}^{(p+y)(\Delta\theta + y\phi_0/p)} I(x, y, \phi, \lambda) \cdot R dx. \quad (10)$$

式中 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 是光源 (x, y) 点上沿 ϕ 方向发出的波长为 λ 光强度, R 是晶体衍射效率, 其余参量意义已示于图 2 中. 式(10)在一定近似条件下可积. 一般情况下, 我们可以假设 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 具有形式如下:

$$I(x, y, \phi, \lambda) = I \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad (11)$$

即 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 在截面 x 方向是方差为 σ 的 Gaussian 分布¹⁾, 在深度上近似为均匀分布, 同时在很小的波长范围及很小的角发散范围内 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 关于波长 λ 是均匀分布的. 下面首先求光源深度范围为 $[0, y_2]$ 情况下的强度积分, y_2 是图 2 中点 2 的 y 坐标. 先将式(10)化为准数形式:

1) 因为 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 在截面另一个方向上分布对能量分辨率影响不大, 所以这里忽略了 $I(x, y, \phi, \lambda)$ 在截面另一个方向上分布.

$$F_L(\Delta\theta_B) = \frac{I \cdot R \cdot p \cdot b}{2} \int_0^{s_0} [\text{erf}((1 + bs)(t + s)) - \text{erf}((1 + bs)(t - s))] ds, \quad (12)$$

式中

$$b = \frac{\sqrt{2}\sigma}{p \cdot \phi_0}, \quad t = \frac{p \cdot \Delta\theta_B}{\sqrt{2}\sigma}, \quad (13)$$

$$s = \frac{y \cdot \phi_0}{\sqrt{2}\sigma}, \quad y = \frac{y \cdot \phi_0}{\sqrt{2}\sigma} \Big|_{y=y_1}^{y=y_2}$$

$$\text{erf}(\zeta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\zeta \exp(-\xi^2) d\xi, \quad (14)$$

erf 是误差函数. 先不考虑 $b \cdot s$ 对积分结果影响, 式 (12) 有解析表达式

$$F_L(\Delta\theta_B) = \frac{I \cdot R \cdot p \cdot b}{2} \{ s_0 [-\text{erf}(t - s_0) + \text{erf}(t + s_0)] + t [\text{erf}(t - s_0) + \text{erf}(t + s_0) - 2\text{erf}(t)] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} [\exp(-(t - s_0)^2) + \exp(-(t + s_0)^2) - 2\exp(-t^2)] \}. \quad (15)$$

图 3(a) 中显示了 s_0 取不同值时, $F_L(\Delta\theta_B)$ 的强度归一化曲线. 从图中可见随着 s_0 增大, t 也即 $\Delta\theta_B$ 的半高宽增大, 因此单色器的能量分辨率下降. 直接由式 (15) 解 $\Delta\theta_B$ 半高宽是困难的, 式 (16) 给出对不同 s_0 值下 $\Delta\theta_B$ 半高宽值作拟合得到的计算公式:

$$\Delta\theta_{L-FWHM}(s_0) = \begin{cases} \frac{2\sqrt{2}\sigma(0.831 + 0.011s_0 + 0.126s_0^2)}{p}, & s_0 \leq 1.5 \\ \frac{2\sqrt{2}\sigma(0.346 + 0.5s_0)}{p}, & 10 \geq s_0 \geq 1.5 \end{cases}, \quad (16)$$

当 $s_0 = 0$, 光源成为只具有截面尺寸的无深度光源,

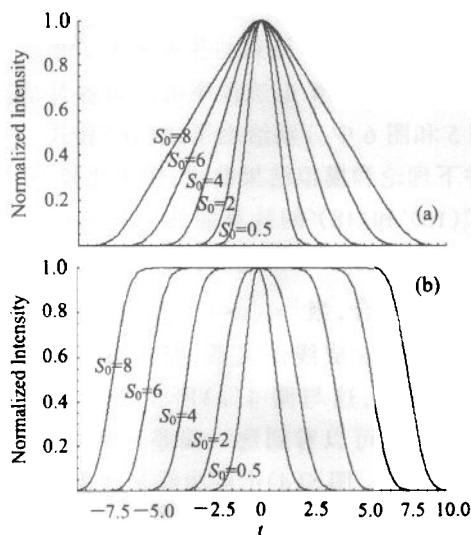


图 3 不考虑 $b \cdot s$ 影响时的 (a) $F_L(\Delta\theta_B)$ 和 (b) $F_D(\Delta\theta_B)$

这时 $\Delta\theta_{L-FWHM}$ 退化为 $\frac{2.35\sigma}{p}$, 这正与此情况下角度半高宽的理想估计 $\frac{2.36\sigma}{p}$ 一致. 从式 (16) 中可以看到, 当光源具有深度时, 实际角度半高宽要大于理想估计的半高宽值.

对没有深度但有截面尺寸的非点光源, 当其不在 Rowland 圆上时, Guinier 条件不再被满足. 这时角度 - 强度分布可由下式计算:

$$F_D(\Delta\theta_B) = \frac{I \cdot R}{2} [-\text{erf}((1 + bs_0)(t - s_0)) + \text{erf}((1 + bs_0)(t + s_0))], \quad (17)$$

式中各参数意义同式 (13), 这里 s_0 代表了物距偏差大小. 式 (17) 实际上是式 (12) 对 s 的微分式. 暂不考虑式中 $b \cdot s$ 的影响, 可得到以下的 $\Delta\theta_B$ 半高宽拟合估计公式:

$$\Delta\theta_{D-FWHM}(s_0) = \begin{cases} \frac{2\sqrt{2}\sigma(0.834 - 0.02s_0 + 0.325s_0^2)}{p}, & s_0 \leq 1.5 \\ \frac{2\sqrt{2}\sigma \cdot s_0}{p}, & s_0 \geq 1.5 \end{cases} \quad (18)$$

当 $s_0 = 0$ 时, $\Delta\theta_{D-FWHM} = \frac{2.36\sigma}{p}$, 与此情况下的角度半高宽理想估计 $\frac{2.36\sigma}{p}$ 一致. 图 3(b) 中显示了 s_0 取不同值时 $F_D(\Delta\theta_B)$ 的强度归一化曲线. 相比于图 3(a), t 也即 $\Delta\theta_B$ 随 s_0 增加增大得更快.

式 (16), (18) 是在不考虑 $b \cdot s$ 影响的条件下得到的, 当考虑 $b \cdot s$ 影响时, $F_L(\Delta\theta_B)$ 和 $F_D(\Delta\theta_B)$ 的峰形都会变化. 为估计 $b \cdot s$ 值对式 (16), (18) 结果的影响, 可以将由式 (16), (18) 计算得到的角度半高宽代入各自强度计算公式得到的值与相应条件下的峰

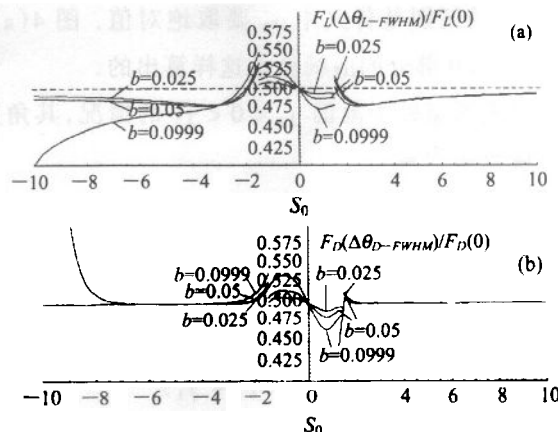


图 4 $b \cdot s$ 对式 (17), (19) 计算角度半高宽影响 (a) 有深度光源情况; (b) 无深度光源情况.

值相比,如果 $b \cdot s$ 影响不大,那么这一比值应接近 0.5.

图 4 是几个不同 b 值下这一比值相对 s_0 所作的曲线;从中可以发现,无论 $F_I(\Delta\theta_B)$ 还是 $F_D(\Delta\theta_B)$,只有在 $b \cdot s$ 趋近 -1 时,这一比值才会明显的偏离 0.5,在其他情况下均与 0.5 偏差不大. $b \cdot s$ 趋近 -1,对有深度光源意味着光源深度近似与物距相等,对无深度光源意味着光源将非常靠近单色器,显然这是实际操作中不可能发生的两种极限情况.从图 4 中可以看到,在极限情况下,式(16), (18)的估计误差在 20% 左右,而在非极限条件下,误差只在 5% 左右.这说明即使不考虑 $b \cdot s$ 影响,式(16), (18)也可对相应几何条件下能量分辨率作比较精确的估计.图 4(a)中比值在 $|s_0| > 2$ 区间中小于 0.5 说明了此几何条件下式(17)的计算结果将比实际值偏大.而图 4(b)中曲线显示,除极限情况外,在大部分区间中式(19)的计算结果都是十分准确的.

对光源点处于范围 $0 \leq y_1 < y_2$ 的情况, y_1, y_2 是图 2 中点 1, 2 的 y 坐标,则角度-强度分布为

$$F_{I1}(\Delta\theta_B) = F_I(\Delta\theta_B)|_{y=y_2} - F_I(\Delta\theta_B)|_{y=y_1} \quad (19)$$

此种情况下 $\Delta\theta_B$ 半高宽与 y_1, y_2 值均有关系,作为近似的估计,可取为

$$\Delta\theta_{I1,FWHM} = \frac{\Delta\theta_{I,FWHM}|_{y=y_2} + \Delta\theta_{I,FWHM}|_{y=y_1}}{2} \quad (20)$$

以上讨论的是光源点物距相对 Guinier 条件所要求物距正偏离,即光源点实际物距偏大的情况.从式(12), (17)可以发现,在不考虑 $b \cdot s$ 条件下,两式是关于 $s_0 = 0$ 中心对称的.因此对负偏离情况,相应条件下角度半高宽计算公式与式(17), (19)相似,惟一的区别是各式中 s_0 要取绝对值.图 4(a), (b)中 $s_0 < 0$ 部分的曲线就是这样算出的.

对光源点处于范围 $y_1 < 0 < y_2$ 的情况,其角度-强度分布为,

$$F_{I2}(\Delta\theta_B) = F_I(\Delta\theta_B)|_{y=y_2} + F_I(\Delta\theta_B)|_{y=y_1}, \quad (21)$$

此种情况下 $\Delta\theta_B$ 半高宽可近似取为

$$\Delta\theta_{I2,FWHM} = \frac{y_2 \cdot \Delta\theta_{I,FWHM}|_{y=y_2} + y_1 \cdot \Delta\theta_{I,FWHM}|_{y=y_1}}{(y_2 + y_1)} \quad (22)$$

以上的式(16), (18), (20), (22)可为 Johann 单色器提供各种情况下能量分辨率定量估计.

以上分析表明,在物距一定的情况下, Johann 单色器能量分辨率是由光源端点 s 参数决定的,单纯地改变光源截面尺寸并不一定会改善能量分辨率.从式(16), (18)可看到,当 $s_0 \geq 1.5$ 以后, $\Delta\theta_B$ 半高宽的增加将只与 $\frac{L \cdot \phi_0}{p}$ 成正比,能量带宽将以光源尺寸

所引入的能量带宽为比例线性增加.对式(16),这意味着系统能量分辨率随光源深度增加而线性下降;对式(18),系统能量分辨率将随物距偏差增大而线性下降.从 s_0 的表达形式来看,较小的光源截面尺寸将使能量分辨率对光源深度或物距偏差更敏感.因此对一个实际光源,当使用 Johann 单色器而需要得到尽量高的能量分辨率,就要根据光源条件,对系统接收角及光源物距综合考虑.

3 SHADOW 追迹结果

对 Johann 单色器,某些作者曾对式(16)和(18)所对应几何条件下能量分辨率给出过估计公式.在不考虑晶体本身接收角宽度条件下,用以上分析中所使用各几何参量,公式表示如下:

有深度光源⁵:

$$\Delta\theta_{FWHM} = \frac{2.355 \sqrt{\sigma^2 + (L \cdot \phi_0)^2}}{p}, L \cdot \phi_0 \leq \sigma \quad (16)'$$

无深度光源⁶:

$$\Delta\theta_{FWHM} = \sqrt{(2p \cdot \phi_0)^2 \left(\frac{1}{p+L} - \frac{1}{p} \right)^2 + \left(\frac{2.355 \cdot \sigma}{p+L} \right)^2} \quad (18)'$$

为验证 2.2 节中得到的各种情况下角度半高宽公式,利用 SHADOW 追迹程序可以对各种情况作模拟.图 5 和图 6 中分别给出了式(16)和式(18)所对应条件下理论和模拟结果曲线;作为比较,图中也给出了式(16)'和(18)'的计算曲线.图 5(a), (b), (c)显示在 $-1.5 < s_0 < 1.5$ 范围内,式(16)与追迹结果有非常好的吻合,当 $|s_0| > 1.5$,追迹结果显示能量分辨率确实与 s 成线性关系,但式(16)计算结果比追迹结果要大,这与图 4(a)所预测的趋势是相合的.从图 5(e)可以看到这一偏差与物距和 Bragg 角没有明显关系.图 5(d)中的曲线是在保持 $s_0 = 4$ 条件下,改变接收角 ϕ_0 和光源深度 L 得到的追迹结果,结果显示能量分辨率确实由 s_0 值所决定,而并不单独受 ϕ_0 或 L 影响.图 5(f)中的曲线是 $s_0 = 4$

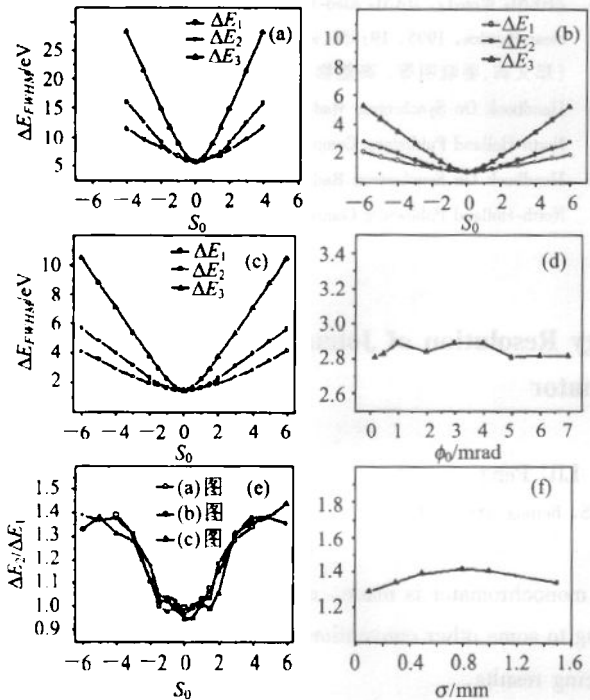


图 5 式(16)对应几何条件下, Johann 单色器能量分辨率理论值与追迹值比较

(a) $p = 15\text{m}, \sigma = 0.5\text{mm}, \phi_0 = 1\text{mrad}, E = 15.53\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 6^\circ, b = 0.047$; (b) $p = 15\text{m}, \sigma = 0.5\text{mm}, \phi_0 = 1\text{mrad}, E = 8.05\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 12.35^\circ, b = 0.047$; (c) $p = 30\text{m}, \sigma = 0.5\text{mm}, \phi_0 = 1\text{mrad}, E = 8.05\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 12.35^\circ, b = 0.024$; (d) $p = 15\text{m}, \sigma = 0.5\text{mm}, E = 8.05\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 12.35^\circ, s_0 = 4$; (e) 图(a), (b), (c)中几何条件下式(17)计算值与 SHADOW 值的比值; (f) $p = 15\text{m}, \phi_0 = 1\text{mrad}, E = 8.05\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 12.35^\circ, s_0 = 4$. 图中 ΔE_1 是 SHADOW 追迹值, ΔE_2 是式(16)计算值, ΔE_3 是式(16)'计算值.

时,改变光源尺寸和光源深度情况下,式(16)能量分辨率计算值与追迹值的比值.结果显示,虽然光源尺寸的改变会导致能量分辨率的改变,但这一比值基本不变.图 5(a), (b), (c)中结果也显示了式(16)'的计算结果在其适用范围内,即 $|s_0| \leq 0.7$ 范围内与追迹结果吻合较好,但在其适用范围之外误差很大.事实上,在 $p \gg |L|$ 条件下式(16)'与式(18)'是相同的,而以无深度光源的情况估计有深度光源情况是不恰当的.图 5(e)显示式(16)相对追迹结果的计算误差比我们预测的 5% 误差大,这可能

是 SHADOW 统计误差造成的.

图 6(a)中的曲线是无深度光源的情况,它显示式(18)的计算结果与追迹结果吻合得很好.式(18)'对于物距正偏离,即 $s_0 > 0$ 的情况符合得较好,但对于 $s_0 < 0$ 的情况则有明显偏差.式(18)'的计算结果不是关于 $s_0 = 0$ 对称,这与追迹结果不相符.

图 6(b)中是式(20), (22)的计算结果与相应条件下追迹结果,从中可以发现计算结果与追迹结果吻合较好.

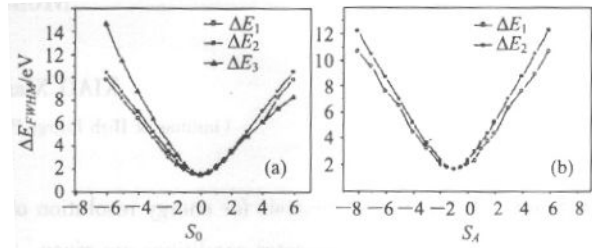


图 6 式(18), (20), (22)对应几何条件下, Johann 单色器能量分辨率理论值与追迹值比较

(a) 光源无深度情况,理论值由式(18)计算, $p = 15\text{m}, \sigma = 0.5\text{mm}, \phi_0 = 1\text{mrad}, E = 8.05\text{keV}$, Si(220)晶体, $\gamma = 12.349^\circ, b = 0.047$; (b) 光源有深度情况,理论值由式(20), (22)计算,光源长度 $L = 1.42\text{m}$,其余参数同(a), S_0 : 光源靠近晶体一端 S 参数. ΔE_1 是 SHADOW 追迹值, ΔE_2 是理论值, ΔE_3 是式(18)'计算值.

4 结论

通过 SHADOW 追迹结果验证,以上对 Johann 单色器在各种几何条件下能量分辨率与追迹结果有较好的吻合.与原有的计算公式相比,新的计算公式更精确,适用范围更宽.在一个高分辨荧光探测系统的后分析晶体优化设计中,本文的结果得到了应用,这方面的内容将在另一篇文章中介绍.

在工作中,胡天斗研究员始终给予了热情鼓励;作者还与阎永廉、姜晓明研究员、郑文莉副研究员以及贾全杰同志进行过有益的讨论.对他们的帮助与支持,表示诚挚的感谢.

参考文献 (References)

- 1 Johann H H. *Z. Phys.*, 1931, **69**:185
- 2 *Handbook On Synchrotron Radiation*. Edited by Ernst-Echhard Koch, North-Holland Publishing Company, New York, 1983, **A**:205
- 3 Rosenbaum G, Holmes K C. In *Synchrotron Radiation Research*, Edited by Winick H. and Doniach S. Plenum Press, New York, 1980, 533
- 4 ZHENG Wen-Li, JIANG Xiao-Ming et al. *High Energy Physics and Nuclear Physics*, 1995, **19**:858 (in Chinese)
(郑文莉, 姜晓明等. 高能物理与核物理, 1995, **19**:858)
- 5 *Handbook On Synchrotron Radiation*. Edited by Ernst-Echhard Koch, North-Holland Publishing Company, New York, 1983, **A**:145
- 6 *Handbook On Synchrotron Radiation*. Edited by Ernst-Echhard Koch, North-Holland Publishing Company, New York, 1983, **A**:295

Theoretical Analysis for Energy Resolution of Johann Monochromator

XIAO Xiang-Hui LIU Peng

(Institute of High Energy Physics, CAS, Beijing 100039, China)

Abstract A theoretical analysis for energy resolution of Johann monochromator is made, and several estimation formulae corresponding to various geometry conditions are given. Comparing to some other conventional formulae, the formulae given in this paper show a better agreement with SHADOW ray tracing results.

Key words synchrotron radiation, monochromator, ray tracing