

# 软 X 射线- 真空紫外傅里叶变换 光谱仪及其光谱分辨率研究

李志刚 齐文宗 李福田

(中科院长春光机所应用光学国家重点实验室 长春 130022)

**摘要** 描述在研的软 X 射线- 真空紫外傅立叶变换光谱仪原理样机预期结构和性能, 讨论并分析了影响谱仪光谱分辨率及谱线位移的因素, 结合大数据量 FFT 数值算法给出实际仪器参数情况下的典型光谱线模拟曲线。

**关键词** 软 X 射线- 真空紫外傅立叶变换光谱仪 光谱分辨率 谱线位移

## 1 引 言

傅立叶变换光谱是通过对光源干涉图进行傅立叶变换从而获得光谱信息的方法。五十年代, Fellgett 和 Jacquinot 分别阐述多重传输和高通量优点之后, 计算机、激光技术及探测器性能的飞速进展使得集高分辨率、高精度、宽光谱范围、杂散光影响小、结构紧凑等优势于一身的傅里叶变换光谱仪成为研究热点。遵循 P. Connes 思想<sup>[1]</sup>, 美、英、德、法等国先后有几十种型号红外或可见光波段傅里叶变换光谱仪问世, 并广泛应用于遥感、生化、红外光谱、天文物理、质谱学、等离子体诊断及信息处理等许多学科领域。随着受控核聚变、X 射线激光、短波段辐射定标、分子转动能级和同位素结构分析、同步辐射特性等研究的不断深入, 迫切需要短波段高分辨率傅里叶变换光谱仪。但由于光波长变短带来对谱仪更高的光学及机械精度要求以及缺乏性能优越的分束器, 使得向短波段延展进程缓慢。直到1986年, 英国伦敦大学帝国理工学院 A. P. Thorne 率先研制出高分辨率的真空紫外傅里叶变换光谱仪, 用于材料吸收和发射光谱研究, 并于1994年在日本光子工厂同步辐射光束线上测量了 NO 和 O<sub>2</sub> 的真空紫外光子吸收截面<sup>[2,3]</sup>。1994年美国 Lawrence Berkeley 实验室 Howells 等人为研究 He 双电离阈附近能量范围 60~ 80eV 的吸收光谱共同提出了软 X 射线傅里叶变换光谱仪的设计方案<sup>[4]</sup>, 测量范围

\* 应用光学国家重点实验室资助课题

10~ 100nm, 光谱分辨率 $5 \times 10^5$ 。这一工作为研究软 X 射线傅里叶变换光谱仪奠定了基础。

本文目的在于阐述课题中正在研制的高分辨率 $10^6$ 采样软 X 射线- 真空紫外傅里叶变换光谱仪基本原理及样机的结构和性能, 并结合实际的仪器设计采用快速傅里叶变换算法计算且初步讨论影响谱仪光谱分辨率的因素及光谱曲线位移的情况。

## 2 软 X 射线- 真空紫外傅里叶变换光谱仪

傅里叶变换光谱仪核心部分是光电记录式双光束干涉仪, 由探测器测量干涉仪出射的相干光束光强变化。谱仪采用结构性能一致的固定镜和动镜, 测量臂一端的动镜可沿其光轴方向移动。动镜与固定镜之间的分束器来自待测光源的光辐射沿参考臂部分反射于固定镜, 部分透射至动镜, 经反射回分束器后, 再次半反半透并相干, 而后入射至探测器接收面。接收到的干涉图光强变化依赖于相干光束的波长及光程差的变化, 携有光源光谱信息。将各波数单色光干涉图函数积分可得到全光谱范围的干涉图函数:

$$I_D(\Delta) = \int 2RT B_0(\sigma) \cos(2\pi\sigma\Delta) d\sigma \quad (1)$$

其中  $R, T$  分别代表分束器的反射率和透射率,  $B_0(\sigma)$  为光源光谱亮度,  $\sigma$  表示波数,  $\Delta$  为光程差。(1) 式的傅里叶积分变换为:

$$B_0(\sigma) = 1/2RT \int I_D(\Delta) \cos(2\pi\sigma\Delta) d\Delta \quad (2)$$

由(2)式看出, 干涉图函数的傅里叶逆变换可得到光源的光谱亮度, 从而获取光谱图信息。

我们目前正在研制的软 X 射线- 真空紫外傅里叶变换光谱仪是集光学、机械、电子学和计算机技术于一体的短波段光谱学分析测量原理样机。主要由光学测量系统、电子学系统及计算机数据处理系统三部分组成。软 X 射线- 真空紫外傅里叶变换光谱仪的性能指标主要由光学测量系统决定。本系统以双光束干涉仪为主体, 辅助以用于控制采样的激光干涉仪和精密动镜移动导轨副及驱动机构。我们采用改进后的迈克尔逊干涉仪结构, 主要光路如图1所示, 与传统迈克尔逊干涉仪相比在结构上有三点不同: 来自光源的光束在分束器B 上的入射角为 $5^\circ$ ; 而不是 $45^\circ$  为消减动镜移动中倾斜的影响, 采用设计上具有高对称性的“猫眼”型后向反射器C (由抛物面反射主镜和严格位于其焦平面上的小平面次镜组成) 代替通常的平面反射镜;

分束- 补偿混合器代替分立的谱仪分束器和补偿板。保证猫眼动镜 $C_1$  直线运动的精密滚动直线导轨副长550mm, 200mm 行程内(相对于零点 $\pm 100$ mm) 精度为 $2\mu\text{m}$ 。为克服电机传动丝杆产生“爬行”影响测量精度, 我们采用高精度液压系统平稳地推进“猫眼”以 $10\text{mm}/\text{min}$  匀速直线运动。将塞曼效应稳频激光器(632.8nm) 与双光束干涉仪结合做为激光干涉仪, 利用光电三极管接收激光干涉条纹信号, 读取干涉条纹进行采样控制。真空紫外光谱的测量要求整个光学系统放置于真空度为 $10^{-3}\text{Pa}$  的真空室内。选取紫外熔石英制作分束- 补偿混合器, 光电倍增管为探测器, 可使谱仪测量波长范围延至170nm。

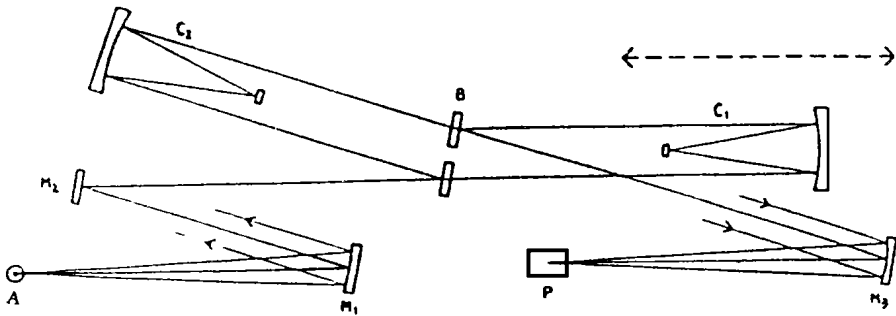


Fig 1 Optical layout of soft x-ray and VUV fourier transform spectrometer. A is entrance aperture; C<sub>1</sub> and C<sub>2</sub> are catseyes; B is beam splitter; M<sub>1</sub> and M<sub>3</sub> are spherical mirrors; M<sub>2</sub> is plane folding mirror; P is photomultiplier tube

### 3 光谱分辨率及谱线位移

在理想情况下, 谱仪获得的线谱宽度无限窄, 即光谱分辨率无穷大。而实际测量中, 计算机不可能处理无限的数据量, 探测器不能探测到无限小光源孔径出射的光通量, 动镜扫描范围有限, 以及光路中衍射的影响等诸多因素会影响数值计算得到的谱线光谱分辨率并产生谱线位移, 最终使得理想光谱变宽。

考虑光谱线宽无限窄的单色点光源  $B_0(\sigma) = \delta(\sigma - \sigma_0)$  为被测光源情况, 设狄拉克函数振幅为1, 干涉图的光强表达式可写为:

$$I_D(\Delta) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\sigma - \sigma_0) \cdot \cos(2\pi\sigma\Delta) d\sigma = \cos(2\pi\sigma_0\Delta) \quad (3)$$

采用复数的傅里叶逆变换, 光程差最大变化范围  $-L$  到  $L$ , 使用欧拉公式得到光谱亮度为:

$$B(\sigma) = \int_{-L}^L \cos(2\pi\sigma_0\Delta) e^{-i2\pi\sigma\Delta} d\Delta \\ = L \left\{ \frac{\sin[2\pi(\sigma + \sigma_0)L]}{2\pi(\sigma + \sigma_0)L} + \frac{\sin[2\pi(\sigma - \sigma_0)L]}{2\pi(\sigma - \sigma_0)L} \right\} \quad (4)$$

结合实际情况, 尤其在短波光谱区域, 第一项相对于第二项可以忽略不计, 则(4)式简化为:

$$B(\sigma) \approx L \operatorname{sinc}[2(\sigma - \sigma_0)L] \quad (5)$$

(5)式表明单色点光源在有限光程差范围内其光谱线型的理论函数为 sinc 函数, 其谱线半高宽为  $0.6/L$ , 与中心位置  $\sigma_0$  相距  $\pm 1/2L$  处为函数的第一零点, 理论光谱分辨率极限为  $1/2L$ 。利用瑞利判据, 两谱线间距为  $0.73/L$  时, 合成谱线有 20% 的凹陷, 可被分辨。

为获取一定量的输入光强, 实际中不可能使用理想点光源, 而扩展光源旁轴光线的存在会直接对光谱分辨率及光谱曲线的变化产生影响。相对于在轴光线相干光束光程差  $\Delta$ , 旁轴光线相干光束间光程差为  $\Delta \cos\theta$ ,  $\theta$  是入射半孔径角(参图 2)。探测器得到的旁轴光线干涉图函数为  $\cos(\pi\sigma_0\Delta \cos\theta)$ , 利用  $\cos\theta \approx 1 - \theta^2/2 = 1 - r^2/2f^2$ ,  $f$  是准直镜焦距,  $R$  为圆孔光阑半径, 使用立体角  $\Omega = \pi R^2/f^2$ , 求出整个光阑孔径内照明干涉图的光强分布为:

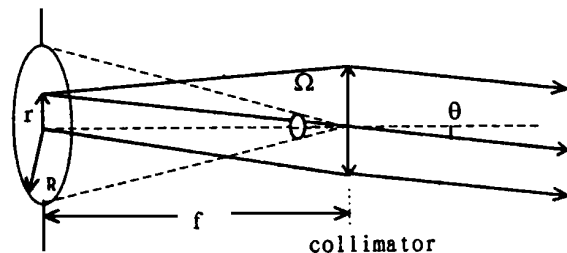


Fig. 2 Effecton of an extended source

$$I(\Delta) = \pi R^2 \text{sinc}(2\sigma_0 \Delta \frac{\Omega}{4\pi}) \cos[2\pi\sigma_0(1 - \frac{\Omega}{4\pi})\Delta] \tag{6}$$

与(3)式理想点光源的情况相比较, 扩展光源干涉图有两点明显变化: 一是实测光谱从真值向低波数方向偏移  $\Omega\sigma_0/4\pi$ , 二是干涉图被 sinc 函数所调制, 同时确定了光谱分辨极限, 为加大光通量而增加光阑孔径会导致光谱分辨率降低. 对于扩展光源且给予理想的无限大光程差变化范围, 其光谱亮度函数表示为:

$$B(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} \text{sinc}(2\sigma_0 \Delta \frac{\Omega}{4\pi}) \cos[2\pi\sigma_0(1 - \frac{\Omega}{4\pi})\Delta] e^{-i2\pi\sigma\Delta} d\Delta = \frac{\text{rect}[\sigma_0, \sigma_0(1 - \frac{\Omega}{2\pi})]}{\frac{\sigma_0\Omega}{4\pi}} \tag{7}$$

可见扩展光源的理想光谱为波数介于  $\sigma_0$  和  $\sigma_0(1 - \Omega/2\pi)$  之间的矩形宽光谱. 若考虑有限光程差  $(-L \sim L)$  情况, 则实验光谱为:

$$B_{\text{exp}}(\sigma) = \int_{-L}^L I(\Delta) \cdot T(\Delta) e^{-i2\pi\sigma\Delta} d\Delta \tag{8}$$

式中

$$T(\Delta) = \text{rect}(\frac{\Delta}{2L}) = \begin{cases} 1 & |\Delta| \leq L \\ 0 & |\Delta| > L \end{cases}$$

$T(\Delta)$  相当于一个宽为  $2L$  的矩形切趾函数, 根据卷积定理, 去掉常数项, 由(8)式计算:

$$B_{\text{exp}}(\sigma) = \text{rect}[\sigma_0, \sigma_0(1 - \frac{\Omega}{2\pi})] * \text{sinc}(2\sigma L) \tag{9}$$

利用大数据量 Singleton- FFT 算法<sup>[5]</sup>, 我们分别编程计算了光阑直径为0.8mm、3mm 和6mm, 对于准直镜焦距500mm, 采样点数 $2^{22}$ , 最大光程差20cm 的实际仪器参数得到的  $50000\text{cm}^{-1}$  波数真空紫外计算模拟光谱图. 从图3可以看出扩展光源照射且有限光程差条件下, 光阑孔径的增大超出理想光谱分辨率的局限会使获得的实验光谱图向低波数漂移, 同时又进一步受 sinc 函数卷积的影响, 从而导致光谱分辨率的下降.

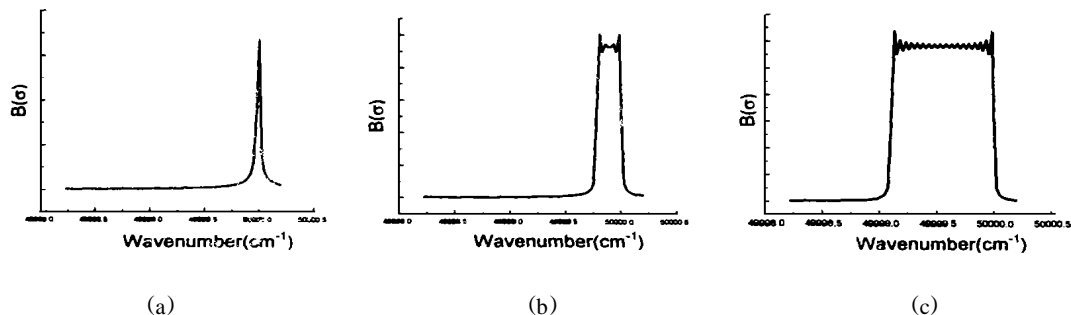


Fig 3 Numerical simulations of experimental spectra due to different extended source size (a) 0.8 nm b) 3 mm c) 6 mm) and finite optical path difference of wave number  $\sigma$

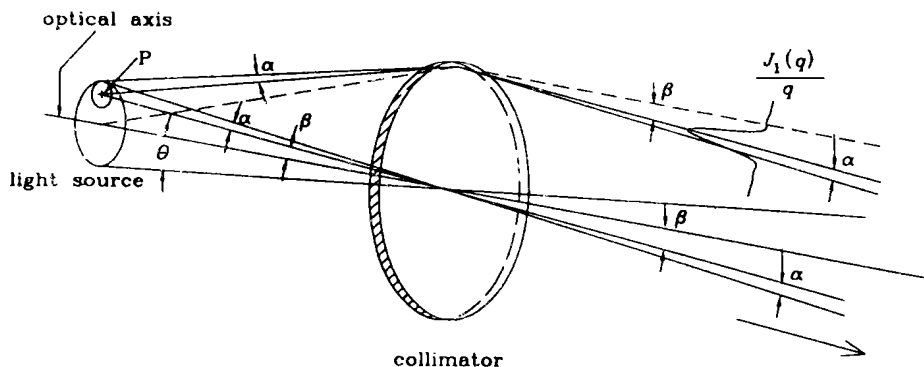


Fig 4 Effect of diffraction in a Fourier transform spectrometer

对于一台有限光源尺寸的迈克尔逊型傅立叶变换光谱仪来说, 衍射效应同样会对获取实验光谱曲线产生影响。依据圆孔夫琅和费衍射理论, 当一准直单色光束通过半径为  $R_D$  的圆孔时, 其夫琅和费衍射光场分布为:

$$I(\beta) = I_0 \left[ \frac{2J_1(q)}{q} \right]^2 \tag{10}$$

式中  $I_0$  对应于  $\beta = 0$  的光强,  $J_1(q)$  是随  $q$  作振荡变化的一阶贝塞尔函数,  $q = 2\pi\alpha R_D \sin\beta$ ,  $\beta$  代表衍射角。现考虑有限扩展光源上与光轴成  $\beta$  角的  $P$  点(图4)。由于准直镜表面的衍射, 来自  $P$  点的辐射在干涉仪中不局限于方向传播。光场围绕角分布为  $I = I(\alpha)$ ,  $I(\alpha)$  符合(10)式的衍射分布。同时  $P$  点周围区域的辐射也对  $\beta$  方向衍射有贡献。其贡献为  $I(\alpha)$  与保留在光源面积内弧长乘积的积分。表示如下:

$$I(\beta) = \int_0^{\beta+\theta} F(\alpha, \beta, \theta) \left[ \frac{2J_1(q)}{q} \right]^2 \alpha d\alpha \tag{11}$$

其中

$$F(\alpha, \beta, \theta) = \begin{cases} 0 & \beta - \theta < \alpha < \beta \\ 1 & \beta < \alpha < \beta + \theta \\ 0 & \alpha < \beta + \theta \\ \frac{\arccos\left(\frac{\beta^2 + \alpha^2 - \theta^2}{2\alpha\beta}\right)}{\pi} & \text{其余} \end{cases}$$

$F(\alpha, \beta, \theta)$  表征以  $P$  点为圆心保存于光源中圆弧长的环带系数。在有限光程差的约束下, 由衍射效应得到单色光谱函数:

$$B_{\text{exp}}(\sigma) = \int_0^{\theta} I(\beta) \cos(2\pi\sigma_0 \Delta \cos \beta) \cdot T(\Delta) e^{-i2\pi\sigma_0 \Delta \beta} d\beta d\Delta \quad (12)$$

上式是包含傅立叶积分变换及一阶贝塞尔函数的多重积分变换。Turku 大学应用物理系 K. I. Salonen 等人研究红外傅立叶变换光谱学中利用求谱线峰值波数的办法得到衍射引起谱线位移的经验公式<sup>[6]</sup>:

$$\Delta\sigma_0 = \frac{6.8 \times 10^{-3}}{R_D} \sqrt{\frac{R}{\sigma_0}} \quad (13)$$

这里  $R$  是理想分辨率即  $1/2L$ ,  $R_D$  为衍射孔半径。我们将其推广并应用在短波段光谱区域, 代入实际仪器参数  $R_D = 10\text{mm}$ ,  $R = 0.025\text{cm}^{-1}$ , 得到  $200\text{nm}$  处光谱线的位移  $\Delta\sigma_0 = 4.8 \times 10^{-6}\text{cm}^{-1}$ , 相对于  $R$  完全可以忽略不计。实际测量中, 还有来自于谱仪内部光散射、光源离焦、动镜运动误差及光路中光轴的准直误差等均对光谱测量有损, 可以用相位校正来弥补<sup>[7]</sup>, 限于篇幅不再赘述。

## 4 结 论

在研软 X 射线真空紫外傅立叶变换光谱仪实验谱线的数值分析表明, 最大光程差即动镜相对零光程差处的最大移动距离及光源孔径的大小对谱线的光谱分辨率影响较大且产生谱线向低波数的偏移, 应根据不同光谱分辨率要求给出适当光阑孔径。衍射效应对于本谱仪实验谱线位移影响较小, 可以忽略。

## 参 考 文 献

- 1 Connes P, Michel G. Astronomical Fourier spectrometer. *Appl Opt* 1975, 14: 2067~ 2084
- 2 Thorne A P, Harris C J, Wynne-Jones L, Learner R C M, Cox G A. Fourier transform spectrometer for the vacuum ultraviolet: design and performance. *J Phys* 1987, E20: 54~ 60
- 3 Yoshino K, Smith P L, Parkinson W H, Thorne A P, Ito K. The combination of a VUV Fourier-transform spectrometer and synchrotron radiation. *Rev Sci Instrum*. 1995, 66(2): 2122~ 2124
- 4 Howells M R, Frank K, Hussain Z, Moller E J, Reich T, Moller D, Shirley D A. Toward a soft X-ray Fourier-transform spectrometer. *Nucl Instr. Meth* 1994, A 347: 182~ 191
- 5 [美] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, Flannery B P, C 语言数值算法程序大全(第二版), 北京: 电子工业出版社, 1995
- 6 Salonen K I, Salomaa I K, Kauppinen J K. Diffraction in a Fourier-transform spectrometer. *Appl Opt* 1995, 34: 1190~ 1196
- 7 Bell R J. *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*. New York: Academic, 1972

## Soft X-ray and VUV Fourier Transform Spectrometer and Spectral Resolution

L I Zhi-Gang, Q I Wen-Zong, L I Fu-Tian

(Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics,  
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022)

### Abstract

In this paper the desired structure and performance of soft X-ray and VUV Fourier transform spectrometer which in developing are described in brief. Some factors which can effect the spectral resolution and the shifts of the line positions are discussed and analyzed. We have obtained numerical simulations of spectral line by using the practical instrument parameters and a kind of FFT algorithm for large number data.

**Key words:** Soft X-ray and VUV Fourier transform spectrometer, Spectral resolution, Shifts of line position

**李志刚** 男, 1972年7月生, 1996年3月毕业于长春光学精密机械学院应用理学院, 获光学专业理学硕士学位, 1996年9月进入中国科学院长春光机所应用光学国家重点实验室攻读博士学位, 现主要从事软 X 射线-真空紫外光谱技术的研究。