

透射光栅谱仪测谱不确定度分析

尚万里[†] 朱托 况龙钰 张文海 赵阳 熊刚 易荣清 李三伟 杨家敏

(中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2013年3月19日收到; 2013年5月15日收到修改稿)

透射光栅谱仪广泛应用于惯性约束聚变和其他激光等离子体相互作用领域. 而辐射光谱的精确测量依赖于测量设备的不确定度. 本文从标定过程出发, 分析了标定实验对透射光栅各级衍射效率带来的不确定度. 结合标定实验带来的不确定度, 分析了实验结果解谱过程带来的不确定度. 给出了 0.1—5 keV 能段测量光谱的不确定度.

关键词: 不确定度, 透射光栅, 实验标定

PACS: 06.20.Dk, 42.79.Dj, 06.20.fb

DOI: 10.7498/aps.62.170602

1 引言

在惯性约束聚变及其他激光与等离子体相互作用领域, 部分激光能量被等离子体吸收后转化为 X 射线, 而 0.1—5 keV 能区的软 X 射线占整个等离子体辐射的绝大部分. 通过诊断激光等离子体发射的软 X 射线谱, 可以研究激光与物质的相互作用、等离子体中的原子物理过程及高温物质的特性等. 透射光栅有着测谱范围宽, 谱分辨较好, 及与记录元件匹配简单等特点, 作为一种重要的色散元件, 在软 X 射线能谱测量中得到了广泛应用^[1-8]. 为了利用透射光栅谱仪进行光谱测量, 首先必须知道透射光栅衍射效率, 包括绝对衍射效率和各级之间的相对衍射效率^[9-12]; 其次需要对实验测量结果进行解谱处理, 得到时间积分的光谱结构. 为此, 许多科研工作者对透射光栅衍射效率以及测量结果解谱过程进行过一系列的研究^[13-16].

透射光栅谱仪测得光谱的不确定度(其他工作中也表述为误差)主要来自于透射光栅标定过程和测量结果解谱过程. 在北京同步辐射源上, 我们利用单色性很好的软 X 射线源, 对用于惯性约束聚变研究的透射光栅衍射效率和 CCD 响应灵敏度进行了实验标定, 并将标定结果应用于打靶实验^[17-20]. 本文根据标定过程及实验结果解谱过程, 分析了透射光栅实验结果的不确定度. 分析方法上, 根据观

测项是否进行统计分析, 分别使用了 A 类和 B 类不确定度分析方法.

2 透射光栅衍射效率标定带来的不确定度

透射光栅的标定实验是在北京同步辐射装置软 X 射线束线站上完成的, 实验布局图如下图 1 所示, 与文献 [17] 的图 1 一致. 在本文中对装置不做详细介绍.

在透射光栅相对衍射效率测量中, X 射线 CCD 上会获得如图 2(a) 所示的典型的衍射光谱. 将衍射光谱沿平行色散方向积分做截面图, 如图 2(b), 同时记录下做截面图所选区域位置. 将每级衍射峰下的积分面积, 然后各峰积分面积扣除相同宽度的本底面积得到各级衍射峰的积分净强度 $I_n (n > 0)$, I_0 , I_1 , I_2, \dots 分别是衍射光谱零级、一级、二级衍射峰. 通过下式可以计算得到相对衍射效率:

$$\eta_n^{\text{relative}} = \frac{I_{\pm n}}{I_0}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

在绝对衍射效率测量中, 将光栅狭缝同尺寸的狭缝置于光栅狭缝同样的位置, 由 X 射线 CCD 记录下狭缝透过光图像, 图像区域积分计数值扣除同样面积的本底计数, 得到光源净强度 I . 通过下式获

[†] 通讯作者. E-mail: wanlishang@gmail.com

得绝对衍射效率:

$$\eta_n^{\text{absolute}} = \frac{I_{\pm n}}{I}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

光栅狭缝尺寸为 $l_{a1} \times l_{a2}$, 快门响应时间为 t_a , 光栅各级衍射到 CCD 上的计数为 N_{an} , 独立狭缝尺寸为 $l_{b1} \times l_{b2}$, 快门响应时间为 t_b , CCD 上计数为 N_b . 考虑到入射到光栅狭缝和独立狭缝上光源强度与源强稳定性、入射到狭缝面的空间位置、光源的单色性有关, 会给实验结果带来不确定度, 此外

狭缝尺寸的测量、CCD 计数、快门响应时间都会带来不确定度, 故引入时间、空间、高次谐波修正项 t', r', λ' . 则 (2) 式变为

$$\eta_n^{\text{absolute}} = \frac{N_{an}/(t_a \cdot l_{a1} \cdot l_{a2})}{N_b/(t_b \cdot l_{b1} \cdot l_{b2})} \cdot t' \cdot r' \cdot \lambda', \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

下面逐项分析 (3) 式中各项的不确定度.

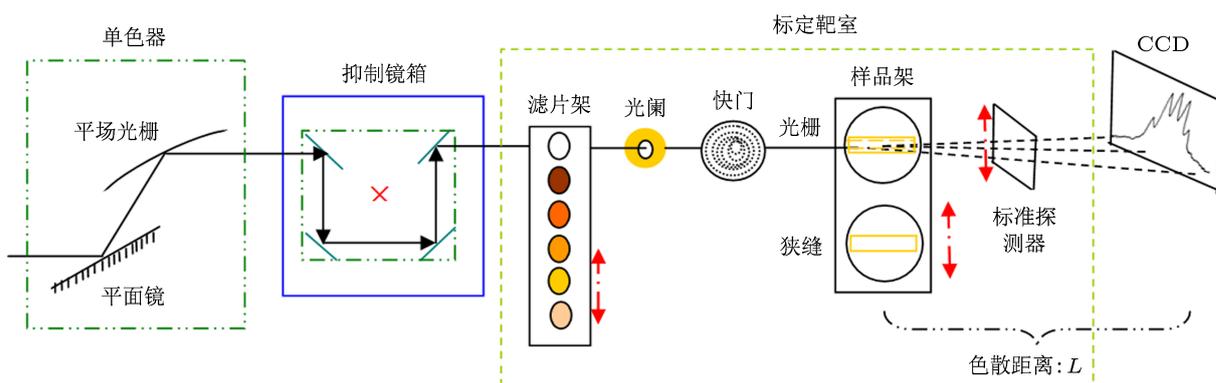


图1 实验布局示意图

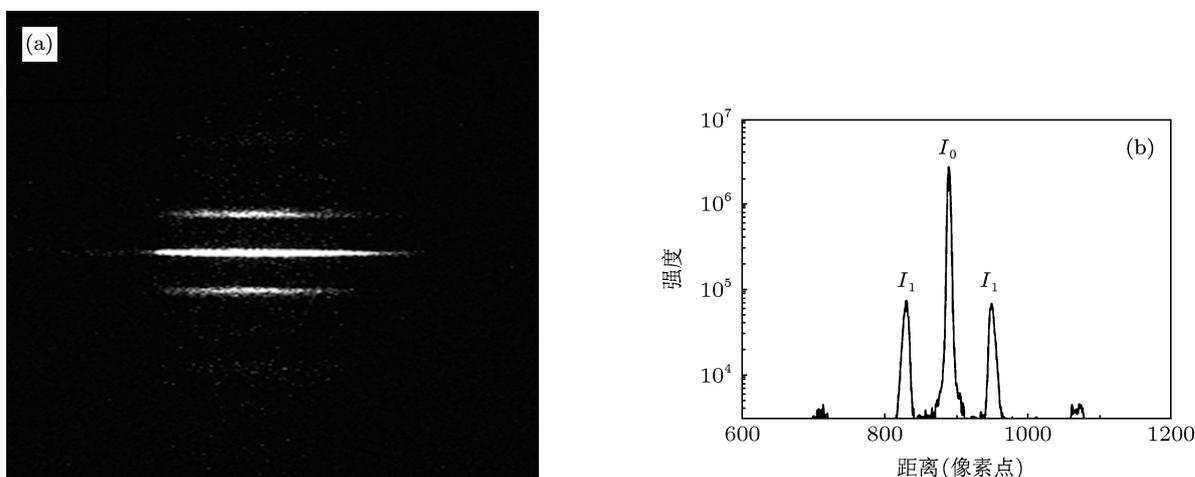


图2 (a) 典型的透射光栅衍射光谱; (b) 典型的衍射强度积分值

2.1 快门响应时间 t 的不确定度分析

透射光栅标定过程中, 曝光时间由机械快门控制, 曝光时间的准确性直接影响着透射光栅标定的准确性. 因此, 在透射光栅标定前, 需要对机械快门响应特性进行标定.

我们在 0.3 keV 条件下测量机械快门响应特性. 调整单色器和谐波抑制镜, 使得单色光能量保持为 0.3 keV, 将样品架上的孔移入光路中, 控制机械快门, 用 X 射线 CCD 记录不同曝光时间下的通光量. X 射线 CCD 获得的典型光斑记录图像如图 3 所示. 将光斑区域的 CCD 计数进行积分, 并扣除大小相

同的非光斑区域本底积分计数, 获得快门标称曝光时间内光斑在 X 射线 CCD 上产生的净计数值. 实验标定时间和计数关系如图 4 所示. 可以看出, 光斑在 CCD 上产生的计数与曝光时间呈线性关系, 最小二乘法拟合得到的表达式为

$$N = kt + b$$

$$= 4.13858 \times 10^7 t + 2.41705 \times 10^6. \quad (4)$$

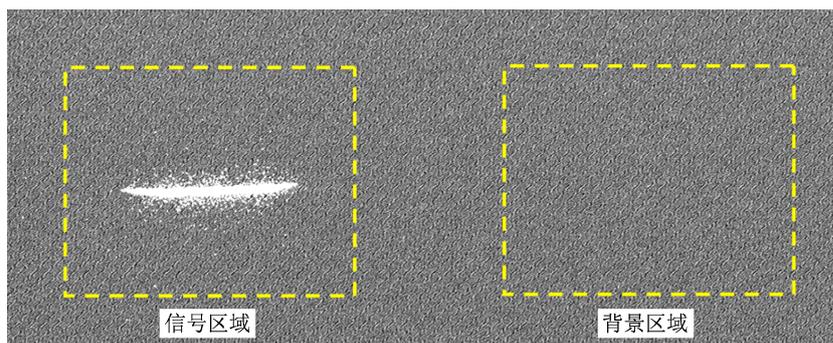


图3 CCD记录的光斑图像

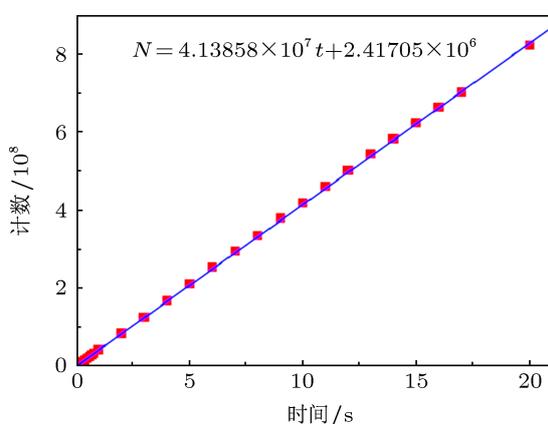


图4 快门标定结果与拟合图

利用上式, 进一步得到快门不同响应时间内的不确定度为 $\delta t = \frac{N-b}{k} - t$, 则相对不确定度为^[21]

$$\frac{\delta t}{t} = \frac{N-b}{kt} - 1. \quad (5)$$

根据 (5) 式得到快门响应时间的相对不确定度, 见图 5. 为减小衍射效率标定过程带来的不确定度, 标定实验中采用的曝光时间一般大于 0.5 s.

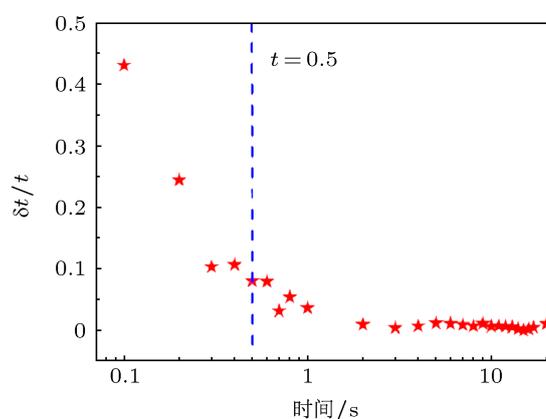


图5 快门标定得到的时间相对不确定度

2.2 独立狭缝和光栅狭缝尺寸的不确定度分析

在标定实验中, 独立狭缝和光栅狭缝长度大于光源尺寸, 因此其长度不会带来不确定度. 分别在 Nikon MM-40 型号光学显微镜下测量独立狭缝和光栅狭缝宽度, 通过人工多次 (n 次) 判读后取平均值, 其标准不确定度采用 A 类不确定度评定方法.

标准不确定度 A 类评估的信息来源于对一个输入量进行多次重复测量得到的测量值, 采用统计分析方法计算标准不确定度^[21].

多次重复测量得到的算术平均值为

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (6)$$

单次测量的实验标准差采用贝塞尔法计算

$$u(x_i) = s(x_i) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}. \quad (7)$$

算术平均值的实验标准差为

$$u(\bar{x}) = s(\bar{x}) = \frac{s(x_i)}{\sqrt{n}}. \quad (8)$$

系统相对不确定度为

$$\frac{\delta x}{x} = \frac{s(x_i)}{\bar{x} \sqrt{n}}. \quad (9)$$

每个测量值经过 10 次测量, 独立狭缝和光栅狭缝宽度相对不确定度分别为

$$\frac{\delta l_{a1}}{l_{a1}} = 1.5\%, \quad \frac{\delta l_{a2}}{l_{a2}} = 1.8\%. \quad (10)$$

厂家提供的该仪器自身测量精度引起的不确定度为 $(3+l)/50$, 我们所用的独立狭缝和光栅狭缝宽度大致为 0.050 mm, 测量带来的不确定度分别为 0.061 μm , 相对不确定度为 0.122%. 由此引入的 B 类不确定度为 δ_B .

综合独立狭缝和光栅狭缝测量过程中的 A 类和 B 类不确定度, 得到总的相对不确定度^[21,22]:

$$\begin{aligned} \frac{\delta l_{a1}}{l_{a1}} &= \sqrt{1.5\%^2 + 0.122\%^2} = 1.505\%, \\ \frac{\delta l_{a2}}{l_{a2}} &= \sqrt{1.8\%^2 + 0.122\%^2} = 1.804\%. \end{aligned} \quad (11)$$

2.3 CCD 计数的不确定度分析

统计涨落是测量仪表的固有特性, 给实际带来了不少麻烦. 为了提高测量精度或准确性, 通常用多次测量的平均值来近似代表其测量的真实值. 当计数强度较大或只适合单次测量时, 可用单次测量的结果 N 来近似代替平均值或真实值, 并由此估计单次测量的标准不确定度 δ , 测量结果可写成 $N + \delta = N + \sqrt{N}$ ^[23]. 标准不确定度 δ 的绝对值随计数 N 的增大而增大, 相对不确定度随计数 N 的增大而减小, $\delta N/N = 1/\sqrt{N}$.



图 6 CCD 作用原理

CCD 作用原理如上图 6 所示. 光子入射到 CCD 灵敏面, 产生电子空穴对, 电子空穴对经过模块转化为电信号, 在记录面上形成计数. 光子入射灵敏面产生电子空穴对是随机过程, 存在着涨落, CCD 量子效率 η_0 与入射光子数 N_0 的乘积 $\eta_0 N_0$ 存在着不确定度 $\delta(\eta_0 N_0)$. (响应灵敏度为量子效率 \times 计数转化率) 相对不确定度为

$$\begin{aligned} \delta(\eta_0 N_0)/\eta_0 N_0 &= \sqrt{\eta_0 N_0}/\eta_0 N_0 \\ &= 1/\sqrt{\eta_0 N_0}. \end{aligned} \quad (12)$$

记录面上计数为 (γ 为 CCD 电子空穴对转化为计数值的增益因子, 与 CCD 增益设置有关)^[19]

$$N + \delta N = \eta_0 N_0 \cdot \gamma + \delta(\eta_0 N_0) \cdot \gamma. \quad (13)$$

相对不确定度为

$$\begin{aligned} \delta N/N &= \delta(\eta_0 N_0) \cdot \gamma / (\eta_0 N_0) \cdot \gamma \\ &= 1/\sqrt{\eta_0 N_0} = \sqrt{\gamma/N}. \end{aligned} \quad (14)$$

在标定实验中我们得到 γ 约为 2.0, 考虑 CCD 统计涨落带来的影响, 然而即使是三级衍射, 其计数积分值也普遍超过 2×10^5 , 带来的统计涨落不确定度约为 0.31%, 一级和二级衍射计数积分值达到 $10^6, 10^7$ 数量级, 带来的不确定度约为 0.14%, 0.04%. 在不确定的分析中, 我们引入统计涨落带来的最大不确定度为 0.31%. 此类不确定度为 B 类不确定度.

2.4 修正项带来的不确定度

2.4.1 光源强度稳定性修正带来的不确定度

在光栅标定过程中, 同步辐射的光源强度随时间衰减, 因此需要对光源强度进行修正. 在同步辐射光源中, 完成电子注入后, 出射 X 射线光强与储存环内电子束流强度近似成正比关系, 因此可以通过电子束流强度变化近似得到 X 射线源强变化. 北京同步辐射光源强度时间关系如图 7 所示.

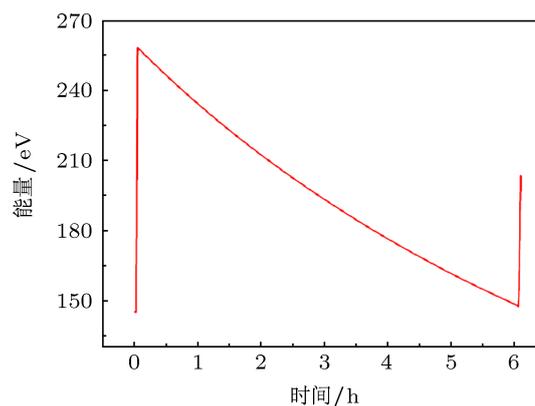


图 7 北京同步辐射光源强度时间关系图

由于我们标定过程中, 切换时间仅为 1—2 min, 从图中可以得到, 束流强度时间变化如此短时间内带来的不确定度小于 0.1%, 在透射光栅衍射效率标定过程中我们引用这一最大不确定度. 然而, 北京同步辐射光源时间上并不连续, 3 ns 周期中束流宽度为 0.2 ns, 不同于惯性约束聚变领域中具体的 X

射线辐射情况,这必然给标定和实验的精度带来影响,需要更深入的研究.

2.4.2 光源强度空间不均匀性修正带来的不确定度

在标定过程中,光栅和狭缝方向尽可能与光斑空间分布较缓的方向正交.即光斑空间分布水平变化较缓,则狭缝和光栅竖直.在独立狭缝和光栅狭缝轮流调换过程中,图像峰值位置精确到每个像素点,保证两者处于光源上同样位置.典型的独立狭缝和光栅狭缝成像数据见图 8.可以看到,两图峰值完全重合.这样只需考虑 CCD 成像面上一个像素点范围带来的不确定度.

本实验 CCD 标定过程中记录了光源空间强度分布.典型图形见图 9.取图 9 右边图像光源沿竖直

方向下降最快部分引入一个像素 20 μm 范围内的不确定度,作为光源不均匀性变化带来的最大不确定度.取值计算得到最大不确定度为 1.4%.

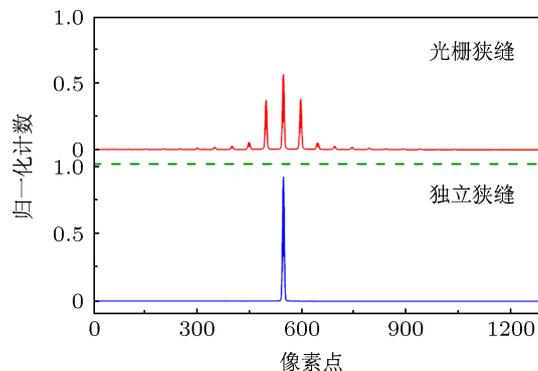


图 8 典型的独立狭缝和光栅狭缝成像数据

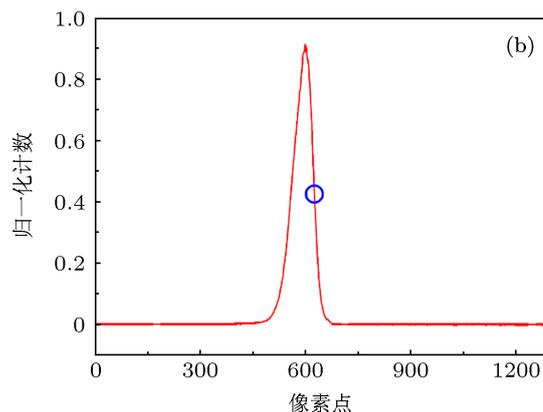
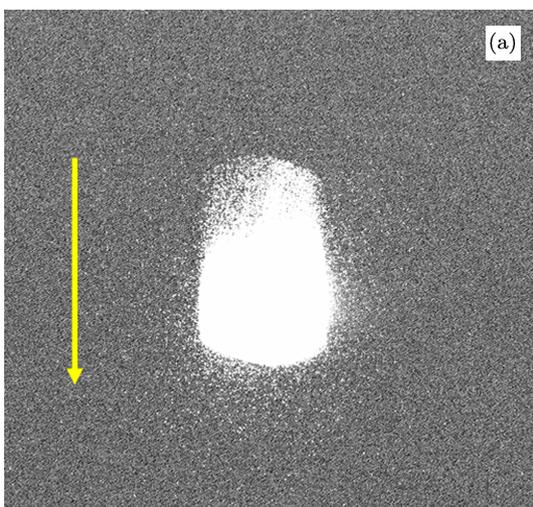


图 9 CCD 记录的光源强度数据,(b)为沿竖直方向强度值

2.4.3 高次谐波修正带来的不确定度

在 0.8—5 keV 范围内,同步辐射光源不含高次谐波,光源相对纯净,标定过程中不存在高次谐波带来的不确定度.在 0.1—0.7 keV 能区范围内,CCD 显示一级衍射计数为

$$N_1(\lambda) = N - \frac{1}{2}N_1\left(\frac{\lambda}{2}\right)\frac{\eta_2\left(\frac{\lambda}{2}\right)}{\eta_1\left(\frac{\lambda}{2}\right)} - \frac{1}{3}N_1\left(\frac{\lambda}{3}\right)\frac{\eta_3\left(\frac{\lambda}{3}\right)}{\eta_1\left(\frac{\lambda}{3}\right)}. \quad (15)$$

三级以上高次高次谐波由于份额太小未作考虑. η_1 ,

η_2 , η_3 为一级、二级、三级衍射效率.在一级衍射效率的计算中,由于高次谐波的带来的不确定度计算过于复杂,参考平面镜反射率标定实验中高次谐波带来的最大不确定度 2.5%,在 0.1—0.7 keV 范围内对光栅衍射效率引入高次谐波不确定度 2.5%.在二级和三级衍射效率的计算中,无需考虑高次谐波带来的影响.

2.5 其他不确定度分析

在标定实验中,光栅衍射图形基本左右对称,由光栅放置等原因造成的衍射不对称带来的不确定度等,设置为 2%.

2.6 各不确定度汇总

结合以上分析, 根据 (3) 式

$$\eta_n = \frac{N_{an}/(t_a \cdot l_{a1} \cdot l_{a2})}{N_b/(t_b \cdot l_{b1} \cdot l_{b2})} \cdot t' \cdot r' \cdot \lambda'$$

以及合成不确定度的评定方法, 进行不确定度合成 [21,22].

对于数学模型 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 当所有输入量是彼此独立、不相关时, 合成标准不确定度的方差可按右式给出, $\delta(y)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 \delta(x_i)^2$. 其中标准不确定度 $\delta(x_i)$ 有的按照 A 类方法评估 (如狭缝、长度等), 有的按照 B 类方法评估 (如 CCD 计数等).

0.8—5 keV 能区内的光栅衍射效率标定不确定度表达式为

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta\eta_n}{\eta_n}\right)^2 &= 2\left(\frac{\delta N}{N}\right)^2 + 2\left(\frac{\delta t}{t}\right)^2 + \left(\frac{\delta l_{a1}}{l_{a1}}\right)^2 \\ &+ \left(\frac{\delta l_{a2}}{l_{a2}}\right)^2 + (\delta t')^2 + (\delta r')^2 + (2\%)^2 \\ &= (0.31\%)^2 + 2\left(\frac{\delta t}{t}\right)^2 + (1.504\%)^2 \\ &+ (1.804\%)^2 + (0.1\%)^2 + (1.4\%)^2 \\ &+ (2\%)^2, \end{aligned} \quad (16)$$

(16) 式中, 后三项为修正项带来的不确定度,

包括光源随时间变化带来的不确定度、空间不均匀性带来的不确定度、及其他实验因素带来的不确定度. 后三者直接引入相对不确定度, 因此不去要分母, 都是百分数. 前面几项的分母, 是求其相对不确定度表达式决定的. 则在 0.1—0.7 keV 能区内光栅衍射效率不确定度表达式为

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta\eta_n}{\eta_n}\right)^2 &= 2\left(\frac{\delta N}{N}\right)^2 + 2\left(\frac{\delta t}{t}\right)^2 \\ &+ \left(\frac{\delta l_{a1}}{l_{a1}}\right)^2 + \left(\frac{\delta l_{a2}}{l_{a2}}\right)^2 \\ &+ (\delta t')^2 + (\delta r')^2 + (\delta\lambda')^2 + (2\%)^2 \\ &= (0.31\%)^2 + 2\left(\frac{\delta t}{t}\right)^2 + (1.504\%)^2 \\ &+ (1.804\%)^2 + (0.1\%)^2 + (1.4\%)^2 \\ &+ (2.5\%)^2 + (2\%)^2. \end{aligned} \quad (17)$$

由 (16), (17) 式得到的 24# 和 25# 两块光栅衍射效率相对不确定度见图 10, 而标定得到的衍射效率见图 11. 由于 24# 光栅衍射效率偏小, 导致标定过程中 CCD 计数偏小, 不确定度相比较 25# 光栅大一些. 图 10(a) 中 0.8 和 0.9 keV 两个能点处相对不确定度较大, 是因为两处同步辐射光源强度较大, 因此需要更短的快门曝光时间. 根据图 4 的分析, 较短的快门时间会带来较大的不确定度.

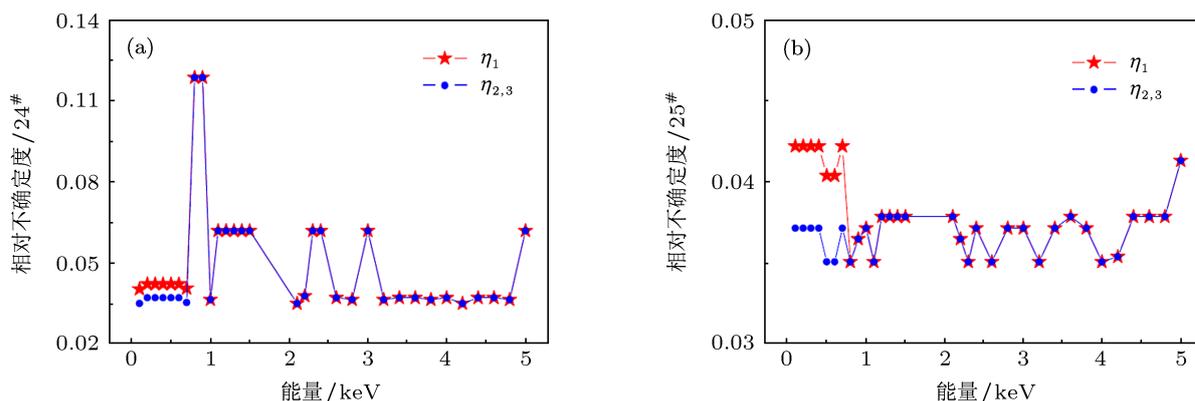


图 10 标定所得透射光栅衍射效率相对不确定度 (a) 24# 光栅; (b) 25# 光栅

3 解谱过程带来的不确定度

透射光栅谱仪解谱公式为 [24]

$$I_s = 8.132 \times 10^{-27} \cdot \frac{l_3(l_1 + l_2)(l_2 + l_3)\lambda^2 N_1}{S_1 S_2 d \eta_1 \eta_{\text{CCD}}}. \quad (18)$$

由光栅解谱过程出发, 得到不确定度由以下方面带来, $l_1, l_2, l_3, S_1, S_2, \lambda, N_1, \eta_1, \eta_{\text{CCD}}$, 0 级的选取, 0

级 1 级边界的选取, 去高级过程, 多道求平均, 图像左右不对称的误差, 各能点光栅衍射效率、CCD 响应灵敏度插值等.

3.1 长度测量带来的不确定度

以上为用卷尺测量的光源到空间分辨狭缝 l_1 、

空间分辨狭缝到光栅 l_2 、光栅到 CCD 的距离 l_3 , 根据误差传递公式, $l_1 + l_2$ 的绝对不确定度为

$$\begin{aligned} \delta(l_1 + l_2) &= \sqrt{(\delta l_1)^2 + (\delta l_2)^2} \\ &= \sqrt{0.45^2 + 0.58^2} \\ &= 0.73, \end{aligned}$$

相对不确定度为 $0.73 / (1070.5 + 2180.8) = 0.045\%$.

$l_2 + l_3$ 的绝对不确定度为

$$\delta(l_2 + l_3) = \sqrt{(\delta l_2)^2 + (\delta l_3)^2}$$

$$= \sqrt{0.58^2 + 0.58^2} = 0.82,$$

相对不确定度为 $0.82 / (1390.2 + 2180.8) = 0.023\%$. l_3 的相对不确定度为 0.04% .

用 Nikon MM-40 型显微镜观测 $14 \times 50 \mu\text{m}$ 空间分辨狭缝, 通过人工多次 (10 次) 判读后取平均值得到, 其标准不确定度采用 A 类不确定度评定方法. S_1 和 S_2 带来的相对不确定度分别为 0.43% 和 0.5% .

于是, 各种长度宽度测量带来的总的相对不确定度为

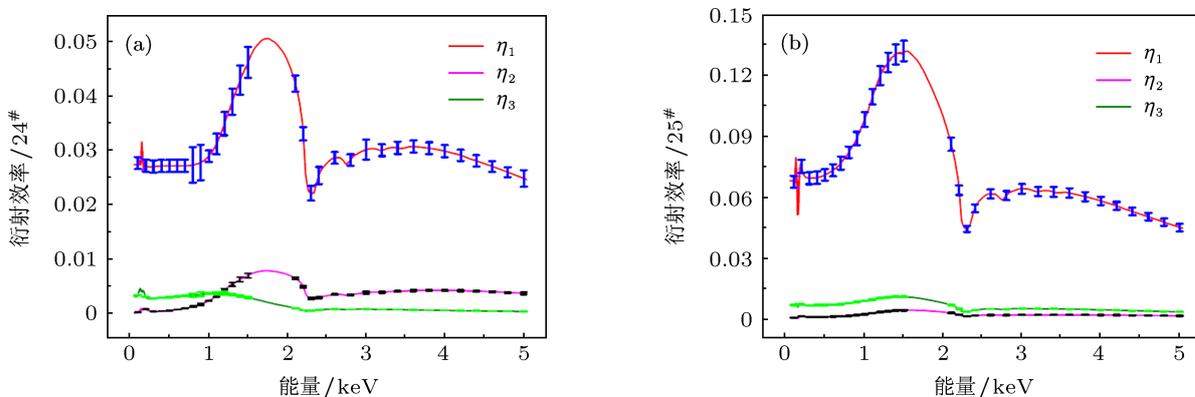


图 11 标定所得透射光栅衍射效率及不确定度 (a) 24# 光栅; (b) 25# 光栅

表 1 神光III原型透射光栅谱仪长度测量值

	第一次	第二次	第三次	第四次	第五次	算术平均值 \bar{x}	实验标准差 $u(x_i)$	标准不确定度 $u(\bar{x})$
l_1/mm	1070	1071	1071.5	1069	1071	1070.5	1	0.45
l_2/mm	2180	2180.5	2181	2181.5	2181	2180.8	1.3	0.58
l_3/mm	1390	1389.5	1390.5	1390	1391	1390.2	1.3	0.58

$$\frac{\delta l}{l} = \sqrt{0.045\%^2 + 0.023\%^2 + 0.04\%^2 + 0.43\%^2 + 0.5\%^2} = 0.66\%. \quad (19)$$

3.2 λ 带来的不确定度

$m\lambda = d \frac{y}{l_3} = \frac{d}{l_3}(y - y_0)$, y_0 为 0 级位置, 则 λ 的不确定度主要由 l_3 , y , y_0 带来, 其中 $y_0 = \frac{1}{2}(y_{\text{peak}} + y_{\text{peak}})$. 对于 y_{peak} , y_{peak} 点不确定度为

$$\delta(y_0) = \sqrt{\frac{1}{2}u(y_{\text{peak}})^2 + \frac{1}{2}u(y_{\text{peak}})^2} = 10 \mu\text{m}.$$

其中 Δr 为最小像素点, 则

$$\delta(y - y_0) = \sqrt{\delta(y)^2 + \delta(y_0)^2} = \sqrt{\left(\frac{\Delta r}{2}\right)^2 + 10^2}$$

$$= 14.1 \mu\text{m}.$$

以神光III原型 20120110053 发透射光栅谱仪数据为例, 认为透射光栅谱仪能测量的最大有效能量为 5 keV, 此时对应的一级色散距离 $y - y_0$ 值最小, 对波长的选取会带来最大的不确定度, 则最大相对不确定度为

$$\begin{aligned} \delta\lambda &= \sqrt{\left(\frac{\delta(y - y_0)}{y - y_0}\right)^2 + \left(\frac{\delta l_3}{l_3}\right)^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{14.1}{57 \times 20}\right)^2 + \left(\frac{0.58}{1390.2}\right)^2} \end{aligned}$$

$$= 1.2\%. \quad (20)$$

3.3 η_1 带来的不确定度

η_1 带来的不确定度由本文 2.3 部分, 由图 10 给出.

3.4 η_{CCD} 引起的不确定度

η_{CCD} 引起的不确定度见图 12, 在文献 [19] 进行了详细讨论.

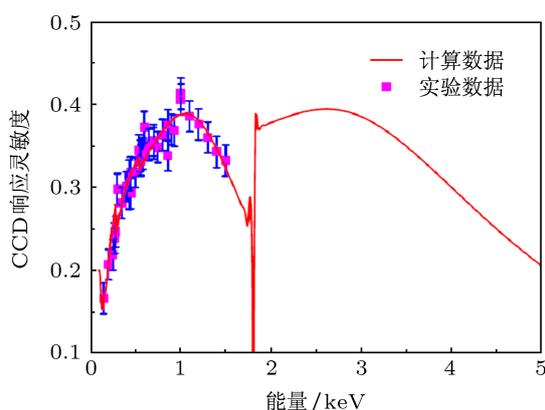


图 12 标定所得 CCD 响应灵敏度

3.5 CCD 计数带来的不确定度分析

此类不确定度为 B 类不确定度, 相对不确定度为 $\delta N/N = \sqrt{\gamma/N}$. 处理方法在本文 2.3 部分进行了详细描述.

3.6 杂散光带来的不确定度分析

在透射光栅谱仪使用过程中, 由于杂散光的存在及较硬 X 射线直接穿透光栅而不经衍射, 会在 CCD 记录面上出现杂散光, 这会给 CCD 计数带来不确定度. 我们将其视为整套透射光栅谱仪本身计数的 B 类不确定度. 由于该不确定度与具体实验现场杂散光情况、光源强度、光栅状态等因素有关, 在此引入一般性不确定度 3%.

3.7 扣本底带来的不确定度分析

在透射光栅谱仪使用过程中, 往往记录数据之前会扣除暗电流等因素带来的 CCD 本底, 也就

是说计数 $N = N_0 - N'$, N_0 为 CCD 初始计数, N' 为 CCD 本底. 该过程也会带来 A 类不确定度. 目前我们使用的 CCD 本底一般为 300 左右计数, 我们以此来得到扣除本底带来的不确定度. 根据上述 CCD 计数不确定度分析, 得到

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta N}{N}\right)^2 &= \frac{\delta N_0^2 + \delta N'^2}{N^2} = \frac{\gamma N_0 + \gamma N'}{N^2} \\ &= \frac{\gamma(N + 2N')}{N^2} = \frac{\gamma(N + 600)}{N^2}. \end{aligned} \quad (21)$$

3.8 N_1 引起的不确定度 (解谱过程) 分析

N_1 为 X 射线一级衍射的 CCD 读数. CCD 读数去高级存一级过程存在不确定度. 需要了解解谱过程. 首先, λ_0 的选取问题. 其为 CCD 能测最小波长, 一般从远离 0 级的第一个波谷算起, $\delta\lambda_0 = \frac{\Delta r}{2} \mu\text{m}$.

$$\begin{aligned} N_1(\lambda) &= N(\lambda) - \frac{1}{2}N_1\left(\frac{\lambda}{2}\right)\eta_{21}\left(\frac{\lambda}{2}\right) \\ &\quad - \frac{1}{3}N_1\left(\frac{\lambda}{3}\right)\eta_{31}\left(\frac{\lambda}{3}\right), \end{aligned}$$

四级及以上衍射忽略不计. 则

$$\begin{aligned} u(N_1(\lambda))^2 &= u(N(\lambda))^2 + \frac{1}{2}u\left(N_1\left(\frac{\lambda}{2}\right)\eta_{21}\left(\frac{\lambda}{2}\right)\right)^2 \\ &\quad + \frac{1}{3}u\left(N_1\left(\frac{\lambda}{3}\right)\eta_{31}\left(\frac{\lambda}{3}\right)\right)^2 \\ &\quad + u(\lambda_0)^2. \end{aligned} \quad (22)$$

$u(\lambda_0)$ 由上面 λ 引起的不确定度计算方法得到. $u(N)$ 由先前计算得出, η_{21} , η_{31} 由标定实验给出.

3.9 多道求平均带来的不确定度分析

多道求平均, 左右不对称, 解谱时各能点光栅衍射效率、CCD 响应灵敏度插值, 带来不确定度无法确定, 未考虑三级衍射以上的高级衍射带来会带来不确定度, 给出相对不确定度 3%.

3.10 各不确定度汇总

综合以上各个方面带来的不确定度, 得到

$$\frac{\delta I_s}{I_s} = \sqrt{\left(\frac{\delta l}{l}\right)^2 + \left(\frac{\delta \lambda}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{\delta \eta_1}{\eta_1}\right)^2 + \left(\frac{\delta \eta_{\text{CCD}}}{\eta_{\text{CCD}}}\right)^2 + \left(\frac{\delta N}{N}\right)^2 + \left(\frac{\delta N_{\text{杂散}}}{N_{\text{杂散}}}\right)^2 + \left(\frac{\delta N_{\text{back}}}{N_{\text{back}}}\right)^2 + \left(\frac{\delta N_1}{N_1}\right)^2 + 0.03^2}. \quad (23)$$

将上述分析结果编入透射光栅谱仪解谱程序,以神光III原型 20120110053 发透射光栅谱仪数据(图 13)为例,对图中 815 道数据(图 13 中黄线)进行解谱,得到光谱及不确定度结果.(CCD 响应灵敏

度 1.6—5 keV 范围内的不确定度标定实验未给出,计算过程中根据 0.1—1.5 keV 范围给出的实验不确定度,设置 1.6—5 keV 范围内的不确定度为 4% (24[#] 光栅).

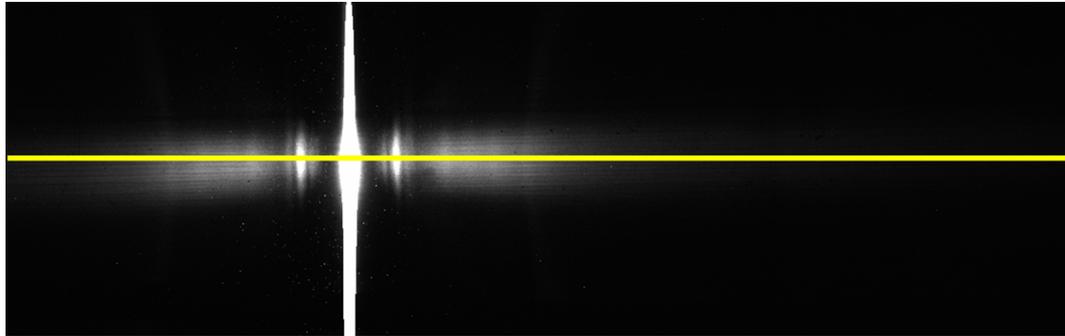


图 13 神光III原型 20120110053 发透射光栅谱仪图像

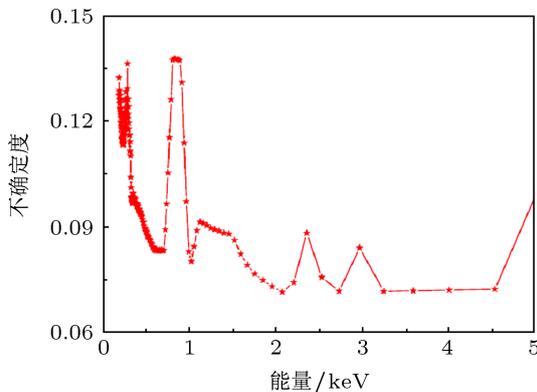


图 14 神光III原型 20120110053 发 815 道各能点解谱相对不确定度

图 14 和图 15 显示了神光III原型 20120110053 发透射光栅谱仪数据得到的解谱结果,可以看到,在 1 keV 以下,光谱不确定度相对较大,而在 1 keV 以上,光谱不确定度相对小一些,这主要是由于标定衍射效率不确定度引起.

4 结论

根据北京同步辐射装置上开展的透射光栅衍射效率标定实验,分析了标定过程带来的不确定度,

并分析了实验结果解谱过程带来的不确定度.以神光III原型 20120110053 发次打靶实验结果为例,分析了测量光谱的不确定度.结果显示,光谱能量在 0.1—1 keV 时,测量不确定度约为 8%—14%;在 1—5 keV 时,不确定度约为 7%—9%.这种不确定度的差异主要由透射光栅衍射效率标定过程引起.通过透射光栅谱仪测谱不确定度的系统分析,了解不确定度各组成部分,改善透射光栅谱仪不确定度情况,提高其测谱精度,有着十分重要的作用.

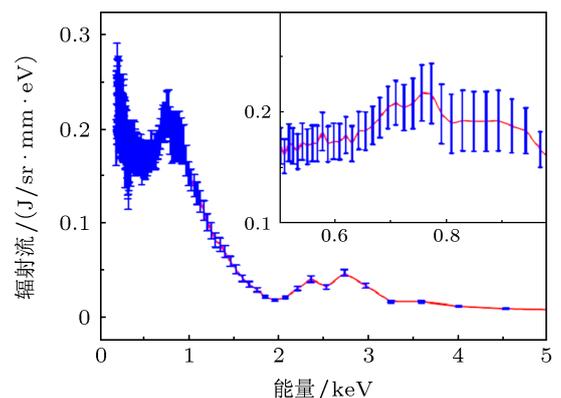


图 15 神光III原型 20120110053 发 815 道解谱结果及不确定度

- [1] Dijkstra J H, Lantwaard L J 1975 *Opt. Commun.* **15** 300
- [2] Brauning H, Kraus H, Dangschat H, Beuermann K P, Predehl P, Trumper J 1979 *Appl. Opt.* **18** 3502
- [3] Arakawa E T, Caldwell P J 1980 *Nucl. Instrum. and Meth.* **172** 293
- [4] Hawryluk A M 1981 *J. Vac. Sci. Tech.* **19** 897
- [5] Bionta R M 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 725
- [6] Ma J, Xie C Q, Ye T C, Liu M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2564 (in Chinese) [马杰, 谢常青, 叶甜春, 刘明 2010 物理学报 **59** 2564]
- [7] Shi P X, Zhou H J, Huo T L, Zhu X L, Ma J, Xie C Q, Zhu W Z, Wu Y Q, Guo Z, Tai R Z, Xu H J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6386 (in Chinese) [史沛熊, 周洪军, 霍同林, 朱效立, 马杰, 谢常青, 朱伟忠, 吴衍青, 郭智, 邵仁忠, 徐洪 2008 物理学报 **57** 6386]

- [8] Chen Y, Qiu K Q, Xu X D, Liu Z K, Liu Y, Fu S J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 120702 (in Chinese) [陈勇, 邱克强, 徐向东, 刘正坤, 刘颖, 付绍军 2012 物理学报 **61** 120702]
- [9] Eidmann K, Kishimoto T, Herrmann P, Mizui J, Pakula R, Sigel R, Witkowski S 1986 *Laser and Part. Beams.* **4** 521
- [10] Mochizuki T, Yabe T, Okada K, Hamada M, Ikeda N, Kiyokawa S, Yamanaka C 1986 *Phys. Rev. A* **33** 525
- [11] Tsakiris G D, Herrmann P, Pakula R, Schmalz S, Sigel R, Witkowski S 1986 *Europhys. Lett.* **2** 213
- [12] Ceglio N M, Kauffman R L, Hawryluk A M, Meddecki H 1983 *Appl. Opt.* **22** 318
- [13] Li Y L, Bai W A, Chen S S, Xu Z Z 1989 *Acta Opt. Sin.* **9** 550 (in Chinese) [李跃林, 白文安, 陈时胜, 徐至展 1989 光学学报 **9** 550]
- [14] Wang Z S, Tian Z H, Chen B, Wang Z, Gao J S, Tian X Z, Chen Z W, Fan P Z, Chen X D 1999 *Spectroscopy and Spectral Analysis* **19** 875 (in Chinese) [王占山, 田振华, 陈斌, 王智, 高劲松, 田兴志, 陈志伟, 范品忠, 陈星旦 1999 光谱学与光谱分析 **19** 875]
- [15] Deng J, Zhong F C, Qin L, Zhang Z Q, Xu Z Z 2000 *Acta Opt. Sin.* **20** 647 (in Chinese) [邓健, 钟方川, 覃岭, 张正泉, 徐至展 2000 光学学报 **20** 647]
- [16] Zhao Y D, Cui M Q, Zhu P P, Cui C W 2000 *High Energy Physics and Nuclear Physics* **24** 1403 (in Chinese) [赵屹东, 崔明启, 朱佩平, 崔聪悟 2000 高能物理与核物理 **24** 1043]
- [17] Shang W L, Zhu T, Xiong G, Zhao Y, Zhang W H, Yi R Q, Kuang L Y, Cao L F, Gao Y L, Yang J M, Zhao Y D, Cui M Q, Zheng L, Han Y, Zhou K J, Ma C Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 034216 (in Chinese) [尚万里, 朱托, 熊刚, 赵阳, 张文海, 易荣清, 况龙钰, 曹磊峰, 高宇林, 杨家敏, 赵屹东, 崔明启, 郑雷, 韩勇, 周克瑾, 马陈燕 2011 物理学报 **60** 034216]
- [18] Shang W L, Yang J M, Zhao Y, Zhu T, Xiong G 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 094216 (in Chinese) [尚万里, 杨家敏, 赵阳, 朱托, 熊刚 2011 物理学报 **60** 094216]
- [19] Zhu T, Zhang W H, Yang J M, Shang W L, Xiong G, Kuang L Y, Zhao Y D, Cui M Q, Zheng L, Tang K, Ju Z Q, Guo Z Y, Ma C Y, Sun L J 2011 *High Power Laser and Particle Beams* **23** 2663 (in Chinese) [朱托, 张文海, 杨家敏, 尚万里, 熊刚, 况龙钰, 赵屹东, 崔明启, 郑雷, 唐坤, 鞠在强, 郭志英, 马陈燕, 孙立娟 2011 强激光与粒子束 **23** 2663]
- [20] Shang W L, Zhu T, Song T M, Zhang W H, Zhao Y, Xiong G, Zhang J Y, Yang J M 2011 *Phys. Plasmas* **18** 042705
- [21] Shi C Y 2007 *Determinations and Cases of Practical Measurement Uncertainty* (China Metrology Publication House) p5 (in Chinese) [施昌彦 2007 实用测量不确定度评定及案例 (北京: 中国计量出版社) 第 5 页]
- [22] Chen B L, Yang Z H, Cao Z R, Dong J J, Hou L F, Cui Y L, Jiang S E, Yi R Q, Li S W, Liu S Y, Yang J M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7078 (in Chinese) [陈伯伦, 杨正华, 曹柱荣, 董建军, 侯立飞, 崔延莉, 江少恩, 易荣清, 李三伟, 刘慎业, 杨家敏 2010 物理学报 **59** 7078]
- [23] Sun P N 2008 *Nuclear Electronics & Detection Technology* **28** 399 [孙普男 2008 核电子学与探测技术 **28** 399]
- [24] Shang W L, Zhao Y, Xiong G, Yang J M, Zhu T 2011 *Plasma Sci. Technol.* **13** 36

Uncertainty analysis of the measured spectrum obtained using transmission grating spectrometer

Shang Wan-Li[†] Zhu Tuo Kuang Long-Yu Zhang Wen-Hai Zhao Yang
Xiong Gang Yi Rong-Qing Li San-Wei Yang Jia-Min

(Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 19 March 2013; revised manuscript received 15 May 2013)

Abstract

Transmission grating spectrometer is applied in the area of inertial confinement fusion and other laser plasma interaction experiments. Accurate spectrum estimation depends on the measurement uncertainty. Based on the transmission grating diffraction efficiency calibration experiments, the uncertainty of diffraction efficiency is analyzed. Then the uncertainty of X-ray spectrum unfolding progress is investigated. The total uncertainty of the measured spectrum is obtained for 0.1 to 5 keV.

Keywords: uncertainty, transmission grating, experimental calibration

PACS: 06.20.Dk, 42.79.Dj, 06.20.fb

DOI: 10.7498/aps.62.170602

[†] Corresponding author. E-mail: wanlishang@gmail.com