



GUANG
PU

光谱学与光谱分析

北京大学出版社

1-2
1982

光谱学与光谱分析 第1, 2集

《光谱学与光谱分析》编委会 编

(钢铁研究总院内)

北京大学出版社出版

(北京大学校内)

北京妙峰山印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

787×1092毫米 16开本 10印张 237千字

1982年10月第一版 1982年10月第一次印刷

印数 0—10000册

统一书号: 13209·50 定价: 1.20元

光谱学与光谱分析

第2卷 第1,2期 1982年10月

相干斯托克斯拉曼散射.....	高振 刘殿友 华峦 郭礎(1)
测量轴对称等离子体辐射源物理参数时所用的几种 Abel 变换法.....	刘克玲(7)
X射线荧光光谱分析L-T方程中D、E值的求法.....	陈远盘 刁桂年(14)
以N ₂ 作冷却气的小功率低气流ICP光源.....	何志壮(21)
土壤中砷的氢化法分离富集-X射线荧光法测定.....	黄衍初 刘全友 王庆广(27)
热抽取-高频放电光电光谱法测定钢中痕量氢.....	陈国充 刁玉玖(31)
原子吸收仪器的测量噪声与精密度.....	梁家濠 朱文娟 金佑国(35)
ICP-AES法测定铀矿坑水中痕量杂质元素的研究.....	刘虎生 冯斌 潘彦林(43)
高纯氯化钠中微量金属杂质钴、铬、镍、钒和钼的化学光谱测定.....	江祖成 孔令英 赵世善 谢金城(48)
空气-乙炔火焰间接原子吸收法测定钢铁中的铝.....	齐天启 何友昭 魏复盛(53)
化学浸蚀-无火焰原子吸收法测定铁锰铝钢沿晶断口中的镁.....	赵世荣 刘广新 谢毓川(56)
氧化钕中14个稀土杂质的光谱测定.....	翁永和 刘振祥(61)
综 述	
现代原子光谱分析光源的进展.....	张 锐(64)
问题讨论	
关于光谱定量分析的基本公式.....	钱振彭(72)
文献评述	
石墨炉原子吸收光谱法的平台原子化技术.....	吴廷照 刘纪琳(74)
微量取样技术在火焰原子吸收光谱分析中的应用.....	莫胜钧(80)
铬的价态对火焰原子吸收测定的影响.....	朱盘石(83)
工作简报	
土壤、植物中铜、锌、铁、锰、钾、钠的原子吸收光谱测定.....	张翠兰 董永涛(86)
光谱干板均匀性的检查.....	钱勇之(87)
仪 器	
计算机与分光光度计的联用.....	黄贤智(92)
QG型氢化物汞发生器的研制.....	刘永铭 孙菊华 宫本玲 林铁铮(98)
新型的M-79光电译谱仪.....	朱金发(103)
自制简易汞气化测定装置.....	徐信棠(107)
实验报导	
固体粉末火焰原子吸收法测定铜的初步试验.....	邓崇新(108)
来稿摘登.....	(111)
译 文.....	(118)
学术活动消息.....	(144)
1981年1—6月原子光谱文献题录.....	(146)

Spectroscopy and Spectral Analysis

Vol. 2, No. 1, October 1982

Contents

Original papers

Coherent Stokes Raman Scattering

.....Gao Zhen, Liu Dianyou, Hua Luan, Guo Chu (1)

The Methods of Abel Change for the Measurement of Physical Parameters
of Axisymmetric Plasma Radiant

.....Liu Keling (7)

The Solution of D, E, Values in the L-T Equation of X-ray Fluorescence
Spectrometry

.....Chen Yuanpan, Diao Guinian (14)

A Study of Inductively Coupled Nitrogen Plasma Source Using low Power
and low Gas Consumption

.....He Zhizhuang (21)

Determination of Arsenic in Soils by X-ray Fluorescence Spectrometry
after Hydride Generation Preconcentration

.....Huan Yanchu, Liu Quanyou, Wang Qingguang (27)

Determination of Trace Hydrogen in Steel by Thermoextraction high
Frequency Discharge Photoelectric Directreading Spectrometry

.....Chen Guochong, Diao Yujiu (31)

The noise and Precision of the Atomic Absorption Spectrophotometer

.....Liang Jialiu, Zhu Wenjuan, Jin Youguo (35)

Determination of Trace Impurities in the Uranium Mineral Water by
ICP-AES

.....Liu Husheng, Feng Bin, Pan Yanlin (43)

Spectrochemical Analysis of Trace Metals (Co, Cr, Ni, V, Mo) in High
Purity Sodium Chloride

.....Jiang Zucheng, Kong Lingying, Zhao Shisan, Xie Lin (48)

Determination of Aluminum in Steel by an Indirect Flame Atomic
Absorption Spectrometry

.....Qi Tianqi, He Youzhao, Wei Fusheng (53)

Determination of Magnesium along the Crystal Plane Section of the
Iron, Manganese, Aluminum Steel by Chemical Leaching-Flameless

Atomic Absorption Spectrometry

.....Zhao Shirong, liu Guangxin, Xie Youchuan (56)

Spectrochemical Analysis of 14 Rare Earth Impurities in Neodymium Oxide

.....Weng Yonghe, liu Zhenxiang (61)

Review

The Progress of Light Source in Modern Atomic Emission Spectroanalysis

.....Zhang Rui (64)

Discussion

On the Fundamental Equation for Quatitative Spectral Analysis

.....Qian Zhenpeng (72)

Literature reviews

Use of the Platform Technique for Furnace Atomic Absorption Spectrometry

.....Wu Tingzhao, liu Jilin (74)

Application of Microsampling Technique on Flame Atomic Absorption Spectrometry

.....Mo Shengjun (80)

The Influence of Valence State of Chromium on Flame Atomic Absorption Spectrometry

.....Zhu Panshi (83)

Notes

Atomic Absorption Spectrometric Determination of Copper, Zinc, Manganese, Potassium and Sodium in Soils and Plants

.....Zhang Cuilan, Dong Yongtao (86)

Examination on Evenquality of Spectrographic Plates

.....Qian Yongzhi (87)

Instrumentations

Computer Copled With Spectrophotometer

.....Huang Xianzhi (92)

Manufacture of QG Type Hydride-Mercury Evolution Device

.....Liu Yongming, Sun Juhua, Gong Benling, lin Tiezheng (98)

New Model M-79 Photoelectric Spectroprojector

.....Zhu Jinfa (103)

Simple Instrument for the Determination of Mercury

.....Xu Xintang (107)

Laboratory report

Preliminary test for the Determination of Copper Utilizing

Solid Sampling Flame Atomic Absorption Spectrometry

..... Deng Chongxin	(108)
Summary account	(111)
Translation	(118)
Academic activity news	(144)
Atomic Spectroscopy Bibliography	(146)

北京第二光学仪器厂
北京光学仪器厂
北京地质仪器厂
北京光学工业公司
天津光学工业公司
冶金部钢铁研究总院

相干斯托克斯拉曼散射

——液体苯和吡啶的宽带CSRS谱——

高 振 刘殿友

华 峦 郭 础

中国科学院化学研究所

相干反斯托克斯拉曼散射 (Coherent antistokers Raman Scattering), 是一种三阶非线性光学效应。基于这一非线性光学效应, 目前已建立了一种记录Raman光谱的新技术。因这一技术具有抗荧光干扰等特点, 它的应用受到了普遍重视[1]。但在另一方面, 和产生CARS的机理相似, 在三阶非线性光学效应中也能产生相干斯托克斯拉曼散射 (简称CSRS)。这已为实验所证实, 并在生产CARS的同时常常有相干斯托克斯拉曼散射产生[2]。但对这一现象的研究以及它们的应用可能性目前尚较缺乏[3,4]。

本文报导了用单次YAG倍频激光与宽带染料激光脉冲所获得的液体苯和吡啶的CSRS谱, 并对CSRS产生的机理及实验方法作了较详细描述。

理 论

当频率分别为 ω_1 和 ω_2 的两个激光辐射场同时作用于某一分子体系时, 可能产生频率为: $\omega_{as} = 2\omega_1 - \omega_2$ 的CARS信号, 但同时也可能产生频率为 $\omega_s = 2\omega_2 - \omega_1$ 的CSRS信号, 两者都是由于分子体系在光场 ω_1 和 ω_2 的作用下引起的三阶非线性极化而产生的。其基本过程都可以用“四波混频”来描述, 如图1所示。当 $\omega_1 - \omega_2$ 恰好等于分子体系的某一拉曼散射振动模

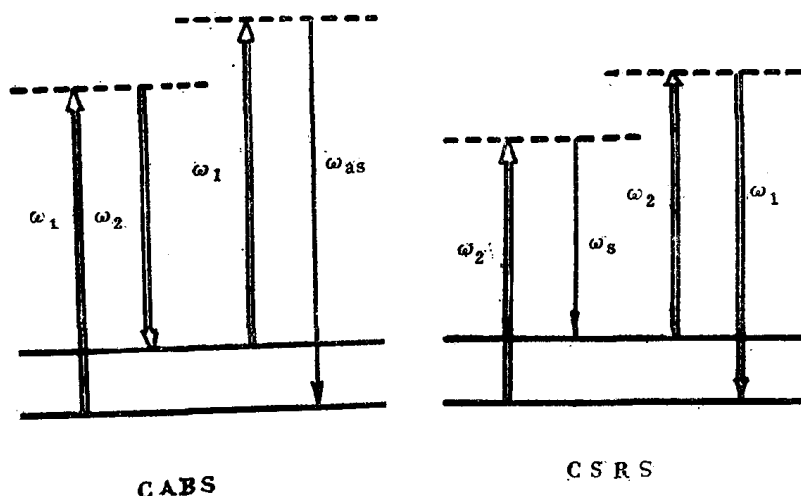


图1 CARS和CSRS的工作原理

• 参加部分实验工作的还有张爱真同志

频率 ω_r 时,所产生的CARS和CSRS信号强度最大,因而可与CARS一样,根据CSRS信号强度随 $\omega_1 - \omega_2$ 的变化情况而获得该分子体系的拉曼散射光谱谱图。

由图一可见,如果交换 ω_1 和 ω_2 的作用,就可以由CARS的“四波混频”过程得到CSRS的“四波混频”过程,反之亦然。因而为推导CSRS的强度公式,可仿效推导CARS强度公式的方法进行^[5]。

在激光辐射场 ω_1 和 ω_2 的作用下,样品产生非线性极化。与CSRS过程相对应的三极非线性极化可表示为:

$$P^{(3)} = x_{CSRS}(\omega_2, \omega_2 - \omega_1) \hat{e}_{CSRS} E^2(2) E^*(1) \exp[i(2K_2 - K_1)\gamma] \quad (1)$$

其中 $x_{CSRS}^{(3)}$ 是三阶电极化系数, $\hat{e}_{CSRS}$ 是极化矢量 $P^{(3)}$ 的单位矢量, K_2 和 K_1 分别是激发场 $E(2)$ 和反斯克斯场 $E(1)$ 的波矢量, γ 是场的空间坐标矢量。在以下的推导中假定激光场为平面波。

$P^{(3)}$ 作为极化场源,发射电场为 $E(\gamma, 3)$ 的光波即CSRS。此与相对应的Maxwell方程为:

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times E(\gamma, 3) - (\omega_3/C)^2 \epsilon_3 E(\gamma, 3) \\ = 4\pi(\omega_3/C)^2 x_{CSRS} \hat{e}_{CSRS} E^2(2) E^*(1) \exp[i(2K_2 - K_1)\gamma] \end{aligned} \quad (2)$$

这里 ϵ_3 是电场 $E(\gamma, 3)$ 的介电常数。

为了求解方程(2),我们约定,我们仅希望电场 $E(\gamma, 3)$ 在 $2K_2 - K_1$ 的方向——取其为 Z 的方向上被放大,并利用 $\hat{e}_{CSRS}(2K_2 - K_1) = 0$ 的性质,则方程(2)可简化为:

$$\begin{aligned} \alpha^2 E(\gamma, 3) / \alpha Z^2 - (\omega_3/C)^2 \epsilon_3 E(\gamma, 3) \\ = 4\pi(\omega_3/C)^2 x_{CSRS} \hat{e}_{CSRS} E^2(2) E^*(1) \exp[i(2K_2 - K_1)Z] \end{aligned} \quad (3)$$

我们假定方程(3)的解为:

$$E(\gamma, 3) = \hat{e}_{CSRS} E^0(3) \exp(iK_3 Z) \quad (4)$$

这里 $K_3 = n_3 \omega_3 / C$, n_3 是折射率, $E^0(3)$ 可以是 Z 的函数。将方程(4)代入方程(3)得:

$$\begin{aligned} \alpha^2 E^0(3) / \alpha Z^2 + 2iK_3 \alpha E^0(3) / \alpha Z \\ = 4\pi(\omega_3/C)^2 x_{CSRS} E^2(2) E^*(1) \exp[i\Delta K Z] \\ \Delta K = 2K_2 - K_1 - K_3 \end{aligned} \quad (5)$$

如果 ΔK 很小,则 $E^0(3)$ 的空间变化也很小,在此条件下,方程(5)中 $E^0(3)$ 的二阶偏微商可以略去,若假定 $Z = 0$ 时, $E^0(3) = 0$,则当 $Z = 1$ 时, $E^0(3)$ 为:

$$E^0(3) = (2\pi\omega_3/n_3 C) x_{CSRS} E^2(2) E^*(1) [\exp(i\Delta K l) - 1] / \Delta K \quad (6)$$

由公式(6)可得CSRS的时间平均强度为

$$\begin{aligned} I_{CSRS} &= (n_3 C / 8\pi) |E(\gamma, 3)|^2 \\ &= \frac{256\pi^4 \omega_3^2}{n_2^2 n_1 n_3} |x_{CSRS}|^2 I_2^2 I_1^2 \left(\frac{\sin(\Delta K l / 2)}{\Delta K l / 2} \right) \end{aligned} \quad (7)$$

由方程(7)可见,CSRS的强度公式与CARS的强度公式在形式上是相似的,其区别是 I_1 和 I_2 , n_1 和 n_2 交换了位置,同时 x_{CARS} 换成了 x_{CSRS} 而已。

当 $\Delta K = 0$, 则 $\lim_{\Delta K \rightarrow 0} \frac{\sin(\Delta K l / 2)}{\Delta K l / 2} = 1$, 此时 I_{CSRS} 随 I^2 线性变化,并称作相位匹配状态。在我们的实验中,由于液体的色散作用,相位匹配只能在 ω_1 和 ω_2 两光束以一定交角入射的情况下才能得到。如图2所示。

当 $\Delta K \neq 0$, I_{CSRS} 随 l 作周期性变化,当 $l = l_c = \pi / \Delta K$ 时, I_{CSRS} 达到第一个极大值。

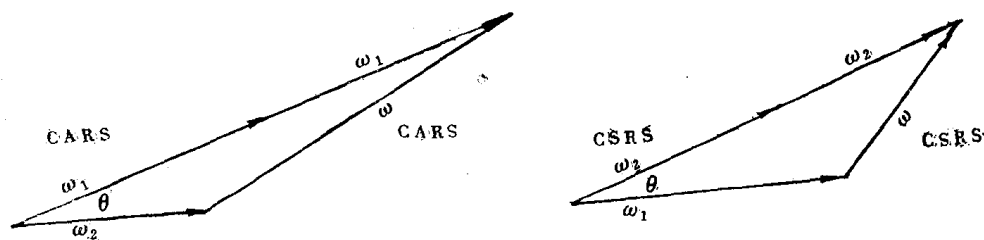


图2 CARS和CSRS的相位匹配条件

I_c 叫相干长度。

由上可见,在实验中满足相位匹配状态是获得强CSRS信号的重要条件。

应指出的是,在我们进行宽带的CSRS实验中,由于 ω_2 光束带宽很大,各CSRS谱线是 ω_1 光波与各不同波长的 ω_2 光波相互作用而产生的,所以当 ω_1 和 ω_2 两束光以任何夹角入射时,要使得产生的所有CSRS信号都同时满足相位匹配状态是不可能的。为了克服宽带CSRS的这一缺点,从理论上考虑,应适当减小 ω_1 和 ω_2 两光束的相互作用长度 l ,因从公式(7)可知,当 $l \ll I_c$ 时, I_{CSRS} 可近似地表示为:

$$I_{CSRS} \approx A |x_{CSRS}^{(3)}|^2 I_2^2 I_1 l^2 \quad (8)$$

这里A是常数,公式(8)表明,此时($l \ll I_c$)就可以使若干CSRS谱线都近似地满足相位匹配条件。

实验装置

单次脉冲,宽带CSRS的实验装置如图3所示。单模调Q的YAG激光器产生波长为1064nm的激光脉冲,其脉宽7ns,线宽 $<1\text{cm}^{-1}$,峰值功率最高可达25MW。这一激光脉冲经KDP晶体倍频而得到波长为532nm的二次谐波光脉冲,并用分光器S将其分为二束,其

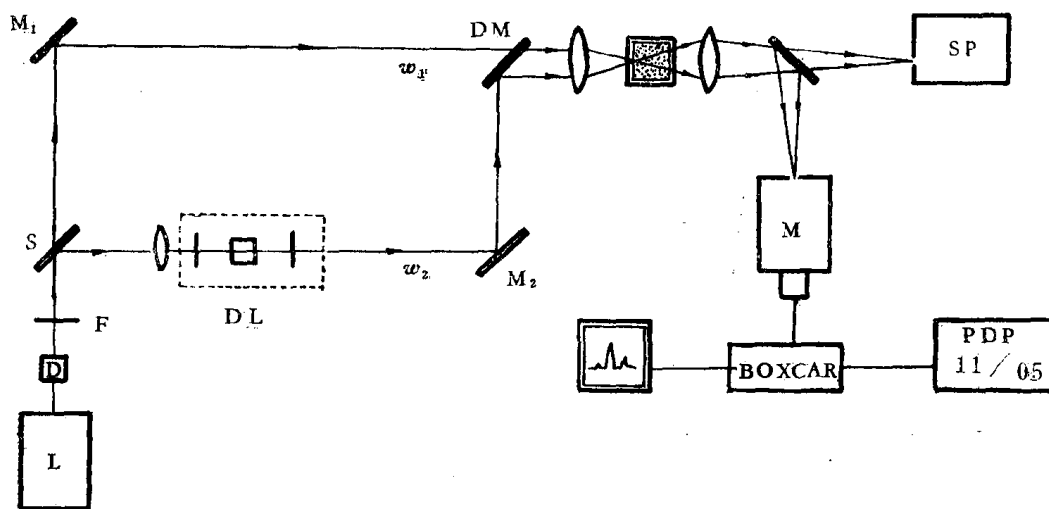


图3 实验装置原理图

L—激光器, D—KDP, S—分束器, F—滤光片, Mi—反射镜
DL—染料激光器, DM—双色镜, SP—摄谱仪, M—单色仪

中一束直接激发样品作为 ω_1 光脉冲,另一束用于抽运无色散元件的染料激光器工作物质(罗丹明G的乙醇溶液),以产生宽带激光输出,作为 ω_2 光脉冲对样品进行激发。 ω_2 光脉冲的强度在550.9~569.5nm范围内呈平滑的连续分布。到达样品池的 ω_1 和 ω_2 光脉冲的强度,主要通过分束器的透过/反射比和各自光程中的衰减情况予以控制。 ω_1 和 ω_2 两光束经消色差透镜 L_1 聚焦在样品池中,两光束之间的夹角通过改变它们在 L_1 聚焦在样品池中,两光束之间的夹角通过改变它们在 L_1 透镜上的间距予以调整。所产生的CSRS信号用透镜 L_2 聚焦到WPP-05型光栅摄谱仪或WDG-500-1型光栅单色仪的入口狭缝上。在前一种情况下,所得信号谱线可直接采用干板摄谱,也可用“二维光强分布电视扫描系统”在“凯歌409A型”监视屏幕上显示,而各谱线的相对强度则用Tektronik7904通用示波器读出,并用Polariod软片记录。在后一种情况下,通过单色仪依次选出不同波长的光信号,经光电倍增管(IP28型)接收后,送入PAR-162型BOXCAR取样平均器和PDP-11/05型电子计算机处理,以求得精确的谱线线型和峰值频率数值。

结 果 与 讨 论

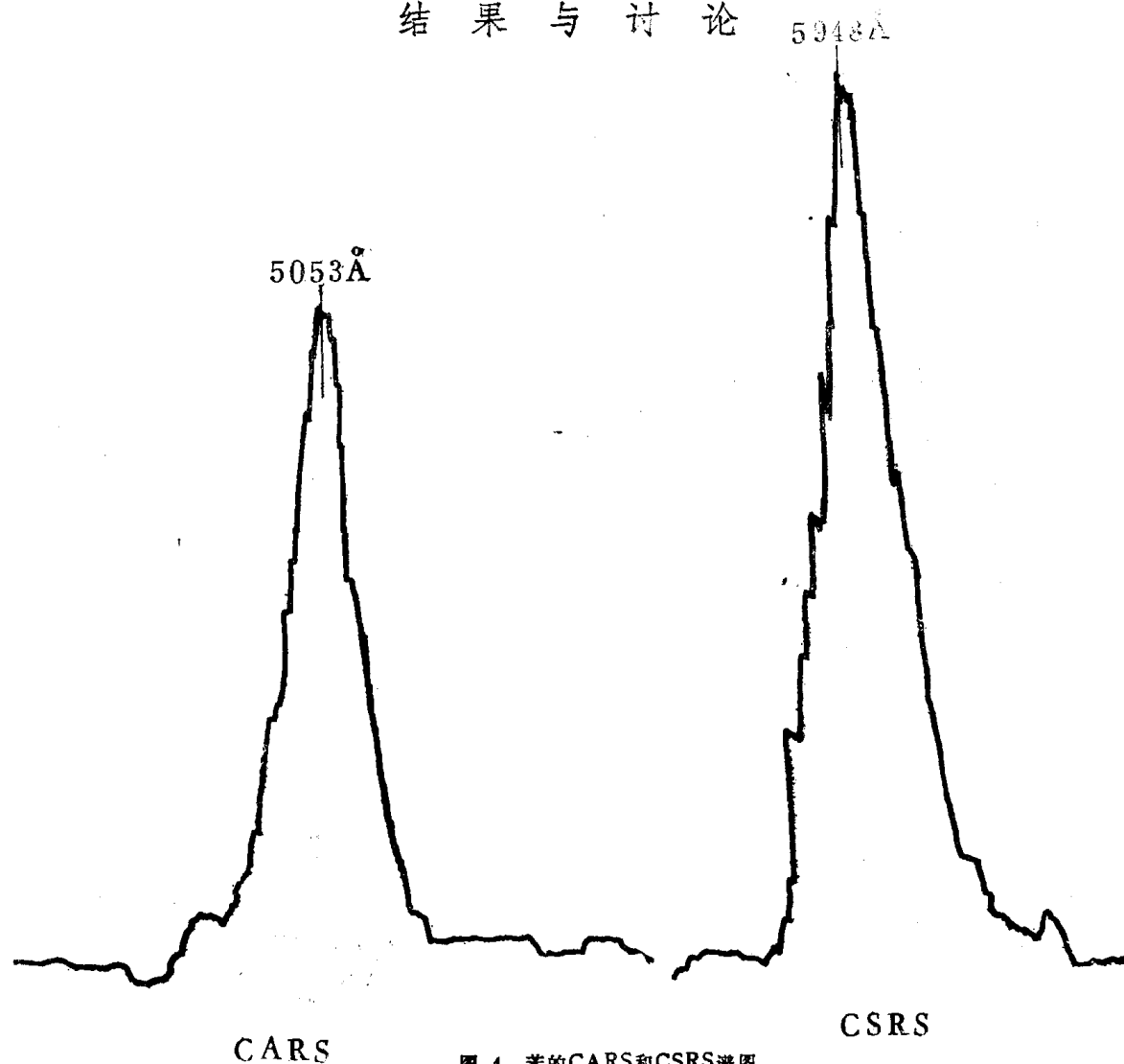


图4 苯的CARS和CSRS谱图

图4是所获得的苯 992cm^{-1} 振动模对应的CSRS谱图,为比较起见,同时示出了苯 992cm^{-1} 振动模所对应的CARS谱图,这个结果与文献所报导的结果一致^[3]。实验中,当仅将 ω_1 或 ω_2 光束遮断,或者改变两光束到达样品池的光程使之在时间上有明显不同步时,这些谱线均消失不见。由此可断言,这些谱线是 ω_1 和 ω_2 两光束同时作用于样品时而产生的,也即是CSRS和CARS信号。

液体吡啶的CARS和CSRS谱图,文献中尚未见报导,我们用单次激光脉冲对样品进行激发,同时获得了几条CSRS谱线。它们的频率和相对强度如图5所示。但应特别指出的是,经验证,图5所示的五条谱线中并不完全是CSRS谱线。为了说明这一点,我们在表1中列出了在同一实验中所获得的吡啶的CARS谱及已知的吡啶拉曼散射谱。由CARS和CSRS产生的机理可知,对CARS过程有贡献的分子振动模,对CSRS过程也有同样的贡献,反之亦然。但从表1可以看出,在CSRS谱图中能产生很强谱线的某些振动模,而在CARS谱图中的谱线强度却很弱,考虑到这些振动模在自发拉曼散射中也难以给出强谱线的事实,我们倾向认为,在CSRS谱图中出现的这些“反常谱线”并不是通常的CSRS过程所产生,而是由于介质中发生了其它的非线性混频过程所致,最可能的是双光子共振器波混频过程。关于这一点尚有待于进一步的实验证明。然而无论如何,这一发现启示人们,宽带CSRS谱的研究有可能为许多非线性光学现象的了解提供一些有趣的实验事实。

表1 液体吡啶的CARS和CSRS谱线频率*

CARS		CSRS		已知的拉曼散射谱线		
$\omega_1 - \omega_2$ cm^{-1}	相对 强度	$\omega_1 - \omega_2$ cm^{-1}	相对 强度	ω	相对 强度	归属
951.0	10	951	5	942	~ 0	B ₁
—	—	973.5	10	980	2	A ₂
990.0	35	990.8	29	991	10	A ₁
—	—	1010.3	13	1007	~ 0	B ₁
1029.0	17	1030.3	10	1031	10	A ₁
1066.5	2	—	—	1069	1	A ₁

* 谱线频率及相对强度均经电子计算机计算而求得

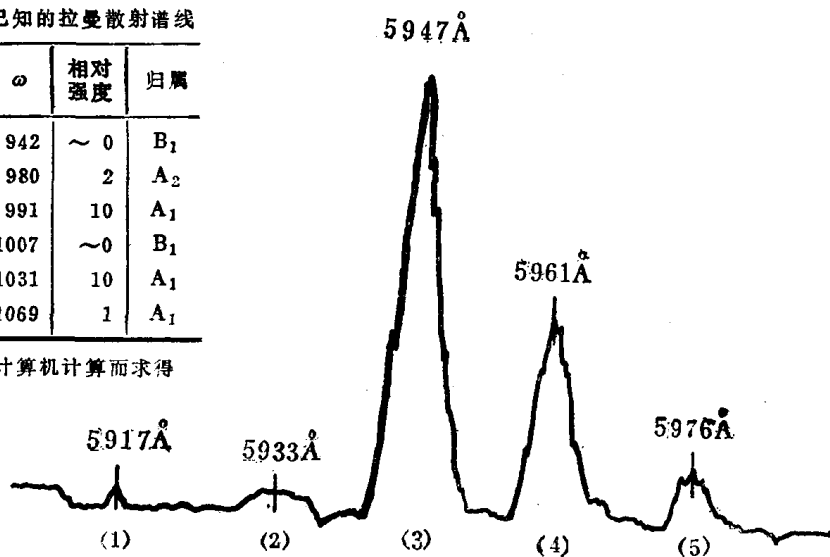


图5 吡啶的CSRS谱图

由上可知,CSRS作为一种光谱新技术,对于分子体系能够给出CARS所能给出的相同的拉曼振动模信息。但CSRS与CARS相比较,因为CSRS的谱线波长位于激发光波长的长波方向,故信号的荧光背景较之CARS为大,这已被实验所证实。不过当CARS的波长处于紫外波段,而CSRS的波长却处于可见光波段时,对CSRS信号的监测又较之对CARS信号的监测方便。尤其应指出的是,在宽带CARS或CSRS实验中,因为可同时得到样品的几个拉曼振动模,或同一振动带的各个拉曼转动结构,所以很好地分解各个谱线是非常重要的。

当我们将YAG激光的二次谐波(其波长为532.0nm)作为频率为 ω_1 的光源,而将由它泵浦的宽带染料激光作为频率 ω_2 的光源,用这二束光在介质中产生CSRS谱,那么这时 $\omega_1 > \omega_2$ 的条件是成立的。在这种条件下我们可以导出如下的公式。由前面的讨论知道

$$\omega_{as} = 2\omega_1 - \omega_2 \quad \text{CARS}$$

$$\omega_s = 2\omega_2 - \omega_1 \quad \text{CSRS}$$

在CARS和CSRS的谱线宽度相近时,两条相邻的CARS谱线的间距为

$$\begin{aligned} |\Delta\omega_{\text{CARS}}| &= |\omega'_{\text{CARS}} - \omega''_{\text{CARS}}| \\ &= |2\omega_1 - \omega^{(1)}_2 - (2\omega_1 - \omega^{(2)}_2)| \\ &= |\omega^{(2)}_2 - \omega^{(1)}_2| \end{aligned}$$

而两条相邻的CSRS谱线的间距为

$$\begin{aligned} |\Delta\omega_{\text{CSRS}}| &= |\omega^{(1)}_{\text{CSRS}} - \omega^{(2)}_{\text{CSRS}}| \\ &= |2\omega^{(1)}_2 - \omega_1 - (2\omega^{(2)}_2 - \omega_1)| \\ &= 2 |\omega^{(2)}_2 - \omega^{(1)}_2| \end{aligned}$$

可见

$$|\Delta\omega_{\text{CSRS}}| = 2 |\Delta\omega_{\text{CARS}}|$$

这说明对一个分子的两个固定的振动频率 ω_1 与 ω_2 (拉曼活性的)。在CSRS的谱图中间距比在CARS的谱图中的间距大一倍。而且对同一振动频率其在CSRS谱中表现出谱线较其在CARS谱线中的谱线宽度大。这两点都已在我们的实验中证实了。我们认为这对于拉曼谱密集的分子来说使用CSRS比用CARS更容易将这些谱线分得更清楚。

还应指出的是,获得CSRS的实验参数与获得CARS的实验参数是不同的。由图2可见,在液体样品的情况下,为满足相位匹配状态,对分子体系的同一个拉曼振动模,CSRS的相位匹配角 θ 不同于CARS的相位匹配角 θ' ;同时,根据CSRS与CARS的强度公式可知,两者对 I_1 和 I_2 的依赖关系是不相同的。因而通过控制 ω_1 和 ω_2 两光束的夹角和强度,可以只得到CSRS,或只得到CARS,这些都已为实验所证实。

参 考 文 献

- [1] S.Druet, J-P, E.Taran, Chemical and Biochemical Applications of Lasers Ed.by C.Bradley Moore, Vol.4, P.187, Academic Press(1978).
- [2] I.Chabay et al., *Appl. phys. Lett.*, 29, 27(1976).
M.D.Levenson, *Phys. Today*, P.44, (1977) May F.R.Aussenegg et al., *opt. Commun.*, 37 1 59(1981).
- [3] J.R.Nester, *J. Raman spectrosc.*, 7, 90 (1978).
- [4] J.P.Boquillon et al., *C.R.Acad.Sci., Paris*, B284 205 (1977).
- [5] J.W.Nibler and G.V.Knighten, Coherent Anti-stokes Raman spectroscopy in Raman spectroscopy of Gases and Liquids, p255 Ed.A.weber, Springer-Verlag Bertin Heidelberg New York (1979).

测量轴对称等离子体辐射源物理 参数时所用的几种Abel变换法

刘 克 玲

中国科学院化工冶金研究所

前 言

为了了解等离子体辐射源的性质,常常需要测量辐射源的各种物理参量,例如温度,电子密度,离子密度,原子密度等等。我们不但要知道这些物理量的平均值,而且往往要知道这些物理量在辐射源中的分布。例如,对于一个圆柱形对称的等离子体辐射源,取其横截面如图1所示。取直角坐标 x 、 y 、 z 。此截面是以 z 轴为中心的圆柱对称。假如 Y 方向为观测方向。 x 把轴上的圆

面直径等分成几份。测量每个等分的光谱线强度,就得到该辐射源在与该谱线对应的波长处的谱线强度的横向分布 $I(x)$ 。谱线强度横向分布 $I(x)$ 定义为:单位时间在垂直于 y 方向的辐射源的单位面积内,单位频率间隔,单位立体角所辐射的能量。而谱线径向强度分布 $E(r)$ 如图2所示,为半径 r 处圆环的面积。图2中圆面为光源的横截面。取圆柱坐标 r 、 θ 、 z 。辐射源以 Z 轴为对称轴,将半径 r 等分成几份。相同处辐射源的发射

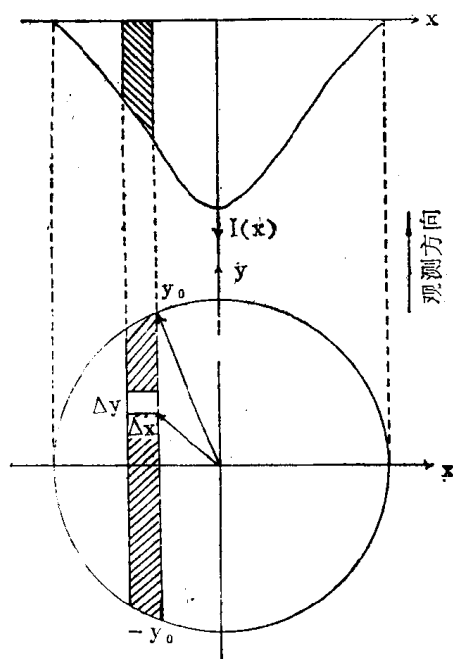


图1 辐射源光谱强度的横向分布

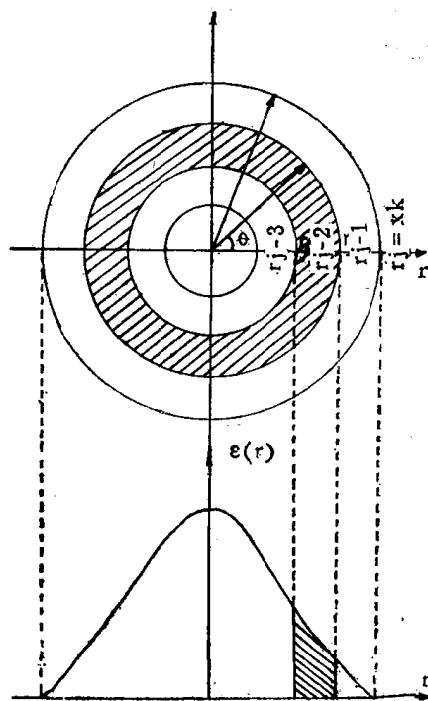


图2 辐射源光谱强度的径向分布

系数应相等。我们定义谱线强度的径向分布 $\varepsilon(r)$ 为：每单位时间，单位体积，单位频率间隔，单位立体角内辐射源辐射的能量。Abel变换是一种数学变换，它的目的就是由实验所测得的自变量为 x 的物理量的横向分布 $I(x)$ 值，求出自变量为 r 的物理量的径向分布 $\varepsilon(r)$ 的值。Abel变换在等离子诊断工作中广泛的被应用^[1-3]。对热平衡或局部热平衡辐射源，就可以用相对谱线强度法^[1,2]，绝对谱线强度法^[3]，分子转动振动带谱线强度法^[4]，测出辐射源中温度的横向分布，再通过Abel变换求出温度的径向分布值，从而求出电子密度，原子密度，离子密度的径向分布。本文较系统地介绍了几种典型的Abel变换法，并给出二种数值法的Abel变换的Fortran语言程序。

Abel积分方程

图(1)中阴影部分的 $I(x)$ 值为，长度为 $2y$ 。而垂直于 y 轴的横截面为单位面积的辐射源区域内所辐射的能量。那么长度为 $2y$ ，而横截面面积为 $\Delta x \cdot \Delta z$ 的体积内等离子体辐射源所辐射的能量为 $I(x) \cdot \Delta x \cdot \Delta z$ 。 $\varepsilon(r)$ 为单位体积内辐射源所辐射的能量，在 $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ 的体积内所辐射的能量为 $\varepsilon(r) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ 。而在长度为 $2y$ ，横截面为 $\Delta x \cdot \Delta y$ 的区域内等离子光源所辐射的能量 $\sum_{-y_0}^{y_0} \varepsilon(r) \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ 。因此，我们可以得到以下方程：

$$I(x) \cdot \Delta x \cdot \Delta z = \sum_{-y_0}^{y_0} \varepsilon(r) \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

取无穷小体积圆，由上式可以得到：

$$I(x) = 2 \int_0^{y_0} \varepsilon(r) dy \quad (1)$$

令 $y = (r^2 - x^2)^{1/2}$ ，代入(1)式中得：

$$I(x) = 2 \int_x^{r_0} \frac{\varepsilon(r) r dr}{(r^2 - x^2)^{1/2}} \quad (2)$$

以上方程称为Abel积分方程。可以用反证法证明^[5]。这个方程的解为：

$$\varepsilon(r) = -\frac{1}{\pi} \int_x^{r_0} \frac{I'(x)}{(x^2 - r^2)^{1/2}} dx \quad (3)$$

但是，由实验中测定的 $I(x)$ 值要通过方程(2)(3)求出 $\varepsilon(r)$ 的值仍然是很困难的。Abel变换就是要解决Abel积分方程求解的问题。Abel变换的形式很多，大致可以归纳为以下几类：图解法^[6]、数值法^[7,8]，图解数值法以及自动Abel变换法^[9,10]。以下将对典型的几种方法分别作一简单介绍。为了方便应用，复杂的数学推导部分在本文中不作详细叙述和证明。

Abel积分方程的几种典型解法

1. H. Brikman图解法

如前所述，Abel积分方程可以求解为(3)式。令 $u = x^2 - y^2$ ，则(3)式可以改写为：

$$\varepsilon(r) = -\frac{1}{\pi} \int_{x-r}^{\infty} \frac{I'(x)}{x} du \quad (4)$$

由实验测得的 $I(x)$ 值，可以作出 $I(x) \sim x$ 曲线，图(3)是Ba弧的 $I(x) \sim x$ 图。由 $I(x) \sim x$ 曲线可以求出 $I'(x)$ 值。为此，将 x 值等分成几份，以每一等份中的 $\Delta I(x)$ 值除以

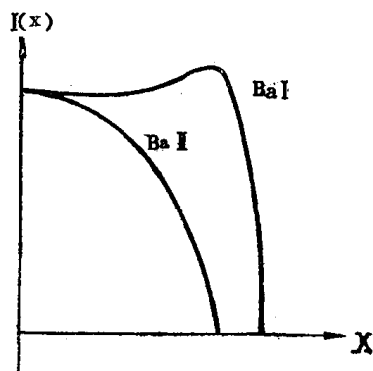


图3 Ba弧的 $I(x) \sim x$ 曲线

Δx 值,即可近似得到对应于各个 Δx 值的 $I(x)$ 值

$$I'(x) \cong \frac{\Delta I(x)}{\Delta X}$$

将直角坐标原点取在狭缝中央, z 轴在狭缝平面内并平行于狭缝。 y 轴在狭缝平面内但垂直于狭缝。 x 轴垂直于狭缝同时垂直于等离子弧柱并为观察方向。因此, $u = x^2 - y^2$ 的表达式中的 y 值为光谱仪的狭缝宽, 为固定值。对应于 n 个 x 值, 就可以求出 n 个 u 值

($u_n > u_{n-1}$)。以 $\frac{I'(x)}{x}$ 对 u 作图, 那么

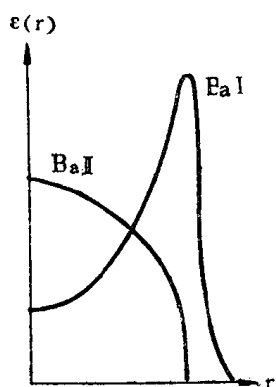


图4 Ba弧的 $\varepsilon(r) \sim r$ 曲线

方程(4)中的 $\varepsilon(r)$ 代表 $\frac{I(x)}{x} \sim u$ 曲线下的面积, $\varepsilon_1(r)$ 对应于 $u_0 \rightarrow u_n$ 区间 $\frac{I'(x)}{x}$ 曲线下的面积, $\varepsilon_2(r)$ 对应于 $u_1 \rightarrow u_n$ 区间曲线下的面积, $\varepsilon_3(r)$ 对应于 $u_2 \rightarrow u_n$ 区间曲线下的面积, 以此类推, 测出 $\frac{I'(x)}{x} \rightarrow u$ 曲线下的几个面积, 就可以求出与几个 $x=r$ 值对应的几个 $\varepsilon(r)$ 值。

2. W.J. Peare数值法

由于光源是圆柱对称的, 所以我们可以只讨论四分之一辐射源的情形。图5为辐射源的四分之一横截面图。根据光谱线的全像高度, 光谱仪的放大率及狭缝宽可以计算出等离子体辐射源横截面的大小。设 y 方向为观察方向, 光源的对称轴与光谱仪狭缝垂直。沿 x 轴将光源像的直径等分成几等份。

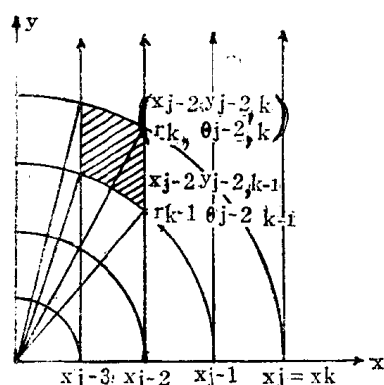


图5 面积圆 $\Delta A_{j-2,k}$ 的计算

$I(x)$ 代表厚度为 t 的辐射源截面的每一等份间隔的区域内光源辐射的光强。而 $\varepsilon(r)$ 代表半径 r 处单位体积内光源的辐射强度。因此, 图(5)中 $\Delta A_{j,k}$ 面积圆内 $I(x)$ 与 $\varepsilon(r)$ 有以下关系:

$$I(x_j) = \varepsilon(r_k) \cdot \Delta A_{j,k} \cdot t \quad (5)$$

即 $I(x_j)$ 等于 $\varepsilon(r_k)$ 与体积 $\Delta A_{j,k} \cdot t$ 的乘积。同理对面积元 $\Delta A_{j-1,k}$ 及 $\Delta A_{j-1,k-1}$ 有以下关系:

$$I(x_{j-1}) = \varepsilon(r_k) \cdot \Delta A_{j-1,k} \cdot t + \varepsilon(r_{k-1}) \cdot \Delta A_{j-1,k-1} \cdot t \quad (6)$$

以此类推:

$$I(x_{j-2}) = \varepsilon(r_k) \cdot \Delta A_{j-2,k} \cdot t + \varepsilon(r_{k-1}) \cdot \Delta A_{j-2,k-1} \cdot t + \varepsilon(r_{k-2}) \cdot \Delta A_{j-2,k-2} \cdot t \quad (7)$$

如果是测量相对强度, 便可以令 $t = 1$ 。而经过简单的几何运算, 可以推导出以上方程组中任意一个面积圆, $\Delta A_{j-m,k-n}$ 的通式如下:

$$\begin{aligned} \Delta A_{j-m,k-n} = & r^2_{(k-n)} (\theta_{j-m-1,k-n} \\ & - \theta_{j-m,k-n}) - r^2_{k-n-1} (\theta_{j-m-1,k-n-1} \\ & - \theta_{j-m,k-n-1}) - x_{j-m} (y_{j-m,k-n} \\ & - y_{j-m,k-n-1}) - x_{j-m-1} \\ & (y_{j-m-1,k-n} - y_{j-m-1,k-n-1}) \end{aligned} \quad (8)$$

例如, 当 $j = k = 10$ 时, 图(5)中面积元 $\Delta A_{j,k} = \Delta A_{10,10}$ 的表达式为:

$$\Delta A_{j,k} = \Delta A_{10,10} = r^2_{10} \theta_{0,10} - y_{0,10} - x_0$$

由光谱线全像高度计算出光谱的半径 r 后, 由(8)式可以计算出所有的面积圆 $\Delta A_{j,k}$ 的

数值。但是,在实际工作中要计算所有的面积圆是很困难的,因为 $\varepsilon(r)$ 值要准确就要求 n 值大,而 n 大时,求各面积圆 $\Delta A_{n..}$ 是一件十分繁重的计算工作。如果用计算机计算就十分简便。 $n=10$ 时, W.J.Pearce 数值法的 Fortran 语言程序见附录 (I)。已知 $\Delta A_{n..}$ 的数值后,由谱线横向强度分布 $I(x)$ 值,运用(5)(6)(7)……等式可以求出 $\varepsilon(r)$ 值。例如,已知 $\Delta A_{j..}$, $I(x_j)$ 值后,可以通过(5)式计算出 $\varepsilon(r_k)$ 值。再由 $\varepsilon(r_k)$, $I(x_{j-1})$ 及 $\Delta A_{j-1..}$, $\Delta A_{j-1,k-1}$ 值,从(6)式可以求出 $\varepsilon(r_{k-1})$ 。已知 $\varepsilon(r_{k-1})$, $I(x_{j-2})$ 及 $\Delta A_{j-2..}$, $\Delta A_{j-2,k-1}$, $\Delta A_{j-2,k-2}$, 通过(7)式可以求出 $\varepsilon(r_{k-2})$ 。以此类推,可以求出全部谱线径向强度分布值。

3. K. Bockaston 数值法

该方法是 Abel 积分方程的一种多项式求解法。 $\varepsilon(r)$ 对 $I(x)$ 展开,展开式可以写成如下形式:

$$\varepsilon_j(r) = r_0^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} a_{jk} I_k(x) \quad (9)$$

其中 r_0 为测量处辐射源横截面的半径; n 为辐射源横截面半径 r_0 的等分数; $a_{j..}$ 是由横向分布变换到径向分布的一系列变换系数。 $a_{j..}$ 是通过计算机求解一系列线性联立方程组得到的,对应于不同的 n 值 $a_{j..}$ 的数值不同。 $n=10$ 和 $n=20$ 时,变换系数 $a_{j..}$ 值见附录(II)。

根据测量所得的 $I(x)$ 值,以及附录中所给出的变换系数 $a_{j..}$ 的数值,可以求出 $I(x)$ 对应的一系列的径向分布 $\varepsilon(r)$ 值。例如 $n=10$ 时,

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(r) = & r_0^{-1} (a_{00} I_0(x) + a_{01} I_1(x) + \\ & a_{02} I_2(x) + a_{03} I_3(x) + \dots + a_{08} I_8(x) \\ & + a_{09} I_9(x)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(r) = & r_0^{-1} (a_{11} I_1(x) + a_{12} I_2(x) + \\ & a_{13} I_3(x) + \dots + a_{18} I_8(x) + \\ & a_{19} I_9(x)) \end{aligned}$$

$$\varepsilon_2(r) = r_0^{-1} (a_{22} I_2(x) + a_{23} I_3(x) + \dots + a_{28} I_8(x) + a_{29} I_9(x))$$

$$+ \dots + a_{28} I_8(x) + a_{29} I_9(x))$$

$$\varepsilon_3(r) = r_0^{-1} (a_{33} I_3(x) + \dots + a_{38} I_8(x) + a_{39} I_9(x))$$

$$\vdots$$

$$\varepsilon_9(r) = r_0^{-1} (\dots + (a_{99} I_9(x)))$$

用计算机可以简化以上计算。已经编好了 Bockaston 数值法的 Fortran 语言程序。

4. 自动 Abel 变换法

自动 Abel 变换是通过在光源前附加一套简单的实验装置,使光电检测系统输出的信号直接给出辐射源辐射强度的径向分布值 $\varepsilon(r)$ 。自动 Abel 变换的优点是精确度高。因为在图解法,数值法的 Abel 变换中,总是采用了某种数学上的近似方法求解。虽然使用计算机可以提高近似求解的精度,但近似仍然存在。在自动 Abel 变换中,无需任何数学近似,就直接自动地给出了光源的径向强度分布成正比数值。

自动 Abel 变换的实验装置原理图如图(6)所示。

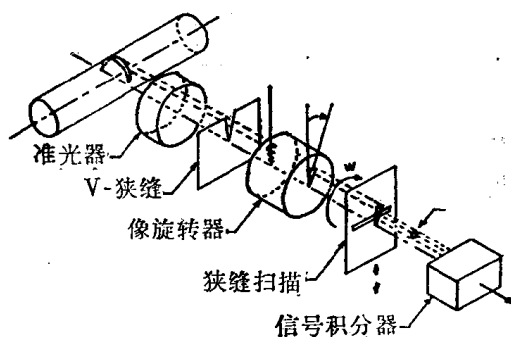


图6 自动Abel变换光路图

假设辐射源为圆柱对称光学的辐射体。准光镜使辐射源发出的光变成一束细长的平行光束。该光束通过狭缝后,变成一束三角形的光束。V狭缝像也以角速度 W 在扫描狭缝的屏上旋转。很多装置都可以作为像旋转器,如dove棱镜等。扫描狭缝是直狭缝,它沿垂直于光轴和辐射源对称轴的方向上下移动,以改变它到光轴的距离。但是,在V狭缝的像对直径的一个扫描周期内,扫描狭

缝的位置不变。因此,只有V狭缝的像与扫描狭缝重叠的部分的光才能通过扫描狭缝而进入信号接收系统。在扫描狭缝和检测器之间可以装设单色仪或滤光片,以便测量与某一波长相对应的强度分布。像旋转器每旋转一周,也就是说V狭缝的像对扫描狭缝每扫描一次,信号积分器则工作一个周期。扫描终了,信号积分器给读数系统一个信号,该信号值代表V狭缝旋转一个周期所检测到的总能。为了计算出总能数学表达式,图(7)给出了各变量之间的关系。虚线部分代表V狭缝像旋转一周的轨迹, r 为直缝到光轴的距离。 θ 为像旋转器旋转的角度。 y 方向为光轴方向,即观察方向, z 方向为光源对称轴方向。以 $U(r)$ 代表V狭缝旋转一个周期积分器所检测到的总能,可以推导出 $U(r)$ 的表达式如下:

$$U(r) = \frac{1}{C} \int_r^{r_0} \frac{I(x) x dx}{(x^2 - r^2)^{1/2}} \quad (9)$$

其中 C 为系统的常数, $I(X)$ 为横向强度分布值, r_0 为辐射源横截面半径。 $U(r)$ 与辐射源径向强度分布 $\varepsilon(r)$ 之间有以下关系:

$$\varepsilon(r) = -\frac{C}{r} \frac{dU(r)}{dr} \quad (10)$$

因为可以证明Abel积分方程(2)除了有(3)式解的形式外,还可以有以下形式的解^[9]:

$$\varepsilon(r) = -\frac{1}{\pi r} \cdot \frac{d}{dr} \int_r^{r_0} \frac{I(x) x dx}{(x^2 - r^2)^{1/2}} \quad (11)$$

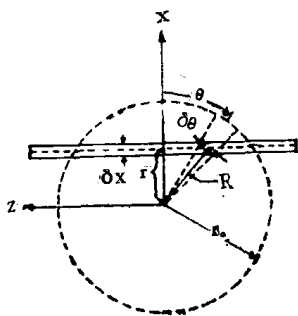


图7 计算总能 $U(r)$ 所用的各变量间的关系

而(11)式的积分部分与(9)式中的积分部分相同。由(9)式和(11)式可以推导出(10)式。

当扫描狭缝处于位置 r 时,信号积分器读数为 $U_1(r)$;当扫描狭缝处于 r_2 时,信号积分器读数为 $U_2(r)$;则(10)式中的 $\frac{dU(r)}{dr}$ 可以近似表示为:

$$\frac{U_2(r) - U_1(r)}{r_2 - r_1} = \frac{\Delta U(r)}{\Delta r}$$

测量出与各个 r 值相对应的 $\frac{\Delta U(r)}{\Delta r}$ 后,根据(10)式可以求出与各个 r 值相对应的 $\varepsilon(r)$ 值。

当 Δr 为常数时,利用(10)式也可以直观地看出辐射源的稳定性,由(10)式可得:

$$\varepsilon(r) \propto \frac{1}{r} \Delta U(r)$$

$r\varepsilon(r)$ 与 $\Delta U(r)$ 成线性关系。因此 $r\varepsilon(r)$ 对 $\Delta U(r)$ 作图,得到一直线。辐射源均匀性的变化将使数据点偏离直线。

几种Abel变换的比较

图解法比较麻烦,而且准确度较差。但是不要求复杂的数学计算。W.J.Pearce数值法计算比较复杂,但该方法所受限制比较少。如果能用计算机按给定程序进行计算就很方便。但是,该方法的准确度仍然不高。K.Bockaston数值法应用较广。但是该方法要预先根据等分数 n 的数值计算出变换系数表。目前已经计算出 $n=10, 20, 40$ 的变换系数表。如果谱线等分的数目不等于10, 20或40时,使用该方法就很麻烦。数值法总的来说比图解法准确。但是,它们仍然是一种近似算法;而且,它要求在进行Abel变换前,对原始数据进行“平滑”,一般要用计算机进行计算。自动Abel变换法操作比较简单。但是,它要求建立一套实验设备。如果经常从事Abel变换的工作,建立这样一套装置还是很适宜的。