

冷气标准谱

Standard Spectra of Cold Gases

杨玖重 (jzhyang@ustc.edu.cn)

Jiuzhong Yang (jzhyang@ustc.edu.cn)

国家同步辐射实验室，燃烧光束线站

BL03U, NSRL, Hefei, China

<http://flame.nsrl.ustc.edu.cn/database/?data=Training>



本作品采用[知识共享署名-非商业性使用-相同方式共享 4.0 国际 \(CC BY-NC-SA 4.0\) 许可协议](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)进行许可。

在此许可下，您可以自由地：

- 共享 — 在任何媒介以任何形式复制、发行本作品
- 演绎 — 修改、转换或以本作品为基础进行创作

只要你遵守许可协议条款，许可人就无法收回你的这些权利。惟须遵守下列条件：

- 署名 — 您必须给出适当的署名，提供指向本许可协议的链接，同时标明是否（对原始作品）作了修改。您可以用任何合理的方式来署名，但是不得以任何方式暗示许可人为您或您的使用背书。
- 非商业性使用 — 您不得将本作品用于商业目的。
- 相同方式共享 — 如果您再混合、转换或者基于本作品进行创作，您必须基于与原先许可协议相同的许可协议 分发您贡献的作品。
- 没有附加限制 — 您不得适用法律术语或者技术措施从而限制其他人做许可协议允许的事情。

若对本作品存在版权疑问，请联系杨玖重(jzhyang@ustc.edu.cn)。

目录

1. 冷气实验条件.....	1
2. 实验结果.....	2
2.1. 直接除以光强，并考虑量子产率校正.....	2
2.2. 直接除以流强，不考虑量子产率校正，再除以标准光通量.....	3
2.3. 结果对比	5
3. 结论.....	6

对于 CH₄、H₂O、CO、O₂、CO₂、Kr 这几个物种的定量计算，这些物种电离能较高，需要在高能下采谱。其中有几个问题：

- 一、CO、O₂、CO₂、Kr 自电离峰特别多；
- 二、由于早期研究中存在高次谐波、量子产率等问题，以及本光束线存在的一些问题，目前未找到适合我们装置的标准光电离截面数据；
- 三、光束线能量分辨较高时，光栅步进电机运动带来的误差将会影响光子能量的重复性；
- 四、由前三个问题导致上述几种物质在某一个能量下的重复性较差。

因此我们采用两种方式提高重复性：

- 一、规定光栅运动时只能从低能往高能扫描，消除步进电机回程误差；
- 二、通过扫描一小段能量范围，用曲线与曲线对比的方式，减少单一能量数据点对比时的误差；

根据 20180926 对 H₂、CH₄、H₂O、CO、O₂、CO₂、Kr 几种物质的精细谱扫描结果，确定实验时在 14.70~14.84 eV 区间扫描，用于上述几种物质的定量计算。其中，对于 CH₄、H₂O，以及其他多原子分子，其电离能较低、光电离截面较平滑，可以采用与标准光电离截面数据对比的方法进行定量计算。

1. 冷气实验条件

本次实验利用 NSRL BL03U JSR 低温氧化装置开展，实验条件为：

表 1 冷气实验条件

总流量	1000 SCCM
压力	760 Torr
喷嘴	80 μm
气体流量	Ar/CH ₄ /CO/O ₂ /CO ₂ /Kr: 810/50/50/50/20/20 SCCM
P _{DIF}	4.49 E-2 Pa
P _{ION}	1.65 E-3 Pa
P _{TOF}	5.49 E-5 Pa
Energy Range	12.5~15 eV, 0.01 eV/step, 10s/point
File Path	E:\2019\201909\氧化\冷气\20190930\P19093001

2. 实验结果

通过两种方式对信号进行积分处理。

2.1. 直接除以光强，并考虑量子产率校正

积分时，选择光强为第 2 项实时光强“Photon Intensity (nA)”，勾选除以光强归一化，以及光强按能量校正并选择“SXUV”，如下：

头部行信息		初始化	X轴 光强
<input checked="" type="checkbox"/>	Energy (eV)	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Photon Intensity (nA)	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Beam Current (mA)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Gap (mm)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Time (sec)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Burner Position (mm)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Temperature (C)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	DiffVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	IonVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	TOFVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
光强本底(nA)		0	
除以光强归一化		光强按能量校正	
<input checked="" type="radio"/> 是		<input checked="" type="radio"/> 是	<input checked="" type="radio"/> SXU
<input type="radio"/> 否		<input type="radio"/> 否	<input type="radio"/> AXU

根据信号处理公式(Cool, *et al.*, 2005)，并根据量子产率 $\eta(E)$ 校正光电流

$I_p(E)$ 得到光通量 $\Phi_p(E)$ ，再归一化：

$$S_i(T) = CP_i(T)\sigma_i(E)D_i\Phi_p(E)F(k,T,P)$$

$$\Phi_p(E)(\text{unit : photons/ sec}) = \frac{I_p(E)(\text{unit : A}) / q_e(\text{unit : C})}{\eta(E)(\text{unit : none})} \quad (1)$$

$$\frac{S_i(T)}{\Phi_p(E)} = \frac{S_i(T)}{I_p(E) / q_e} = S_i(T, NC_{\text{Normalized \& Corrected}}) = CP_i(T)\sigma_i(E)D_iF(k,T,P)$$

$\frac{I_p(E)/q_e}{\eta(E)}$ 这部分在积分程序里即是光强按能量校正选项。

结果如下，可选用 14.70~14.84 eV 范围作为标准谱比对定量计算：

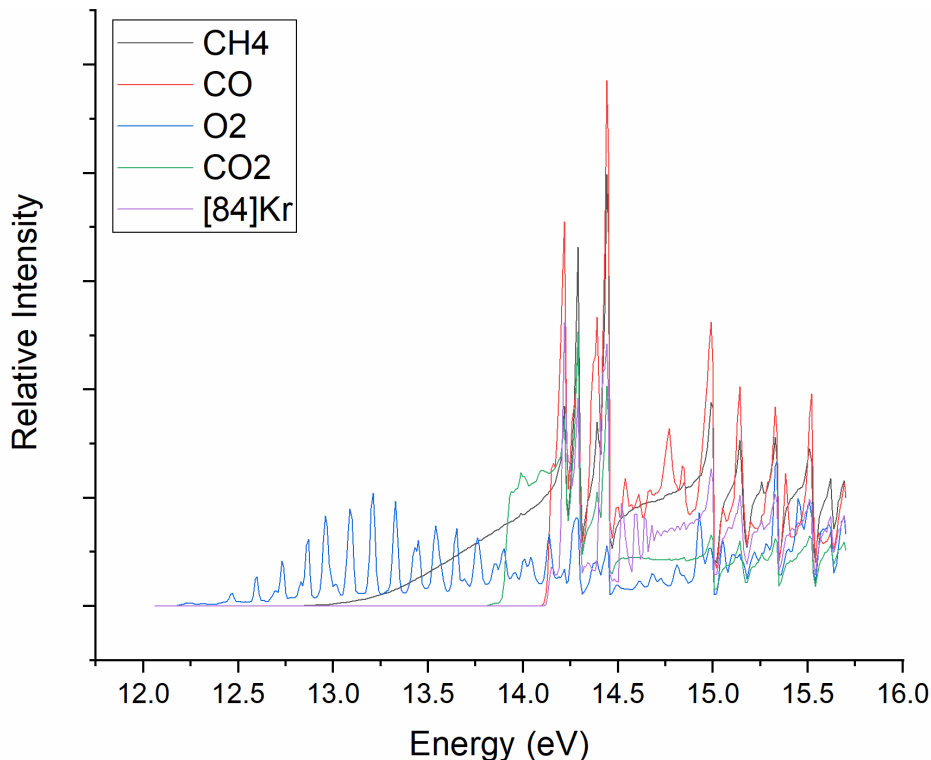


图 1 标准谱（直接除以光强，并考虑量子产率校正）

2.2. 直接除以流强，不考虑量子产率校正，再除以标准光通量

如果实验时忘记记录光强，可在积分时，选择光强为第 3 项 “Beam Current (mA)”，代表束流强度 $BC(t)$ ， t 为时间，除以光强归一化勾选 “是”；光强按能

量校正选择 “否”，得到 $\frac{S_i(T)}{BC(t_1)}$ ：

$$S_i(T) = CP_i(T)\sigma_i(E)D_i\Phi_p(E)F(k,T,P)$$

$$\frac{S_i(T)}{BC(t_1)} = CP_i(T)\sigma_i(E)D_i\frac{\Phi_p(E)}{BC(t_0)}F(k,T,P) \quad (2)$$

头部行信息		初始化	X轴 光强
<input checked="" type="checkbox"/>	Energy (eV)	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Photon Intensity (nA)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Beam Current (mA)	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Gap (mm)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Time (sec)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Burner Position (mm)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Temperature (C)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	DiffVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	IonVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	TOFVac (Pa)	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
光强本底(nA)		0	
除以光强归一化		光强按能量校正	
<input checked="" type="radio"/>	是	<input type="radio"/>	是
<input type="radio"/>	否	<input checked="" type="radio"/>	否
		<input type="radio"/>	SXU
		<input checked="" type="radio"/>	AXU

其中 $BC(t_1)$ 表示实验时的束流强度， $BC(t_0)$ 是测量标准光通量时的束流强度。

$\frac{\Phi_p(E)}{BC(t_0)}$ 表示经过流强归一化并且考虑不同能量量子产率校正的标准光通量，可

以通过后续单独测量不同光子能量下的光强再除以流强归一化，或者调用之前的标准光通量曲线（按 300 mA 流强归一化，参考《BL03U 光束线参数》文档中标

准光通量 $\frac{\Phi_p(E)}{BC(t_0)}$ 部分）。公式(2)演变得到：

$$\frac{S_i(T)}{\frac{BC(t_1)}{\Phi_p(E)}} = S_i(T, NC_{Normalized \& Corrected}) = CP_i(T) \sigma_i(E) D_i F(k, T, P) \quad (3)$$

结果如下，可选用 14.70~14.84 eV 范围作为标准谱比对定量计算：

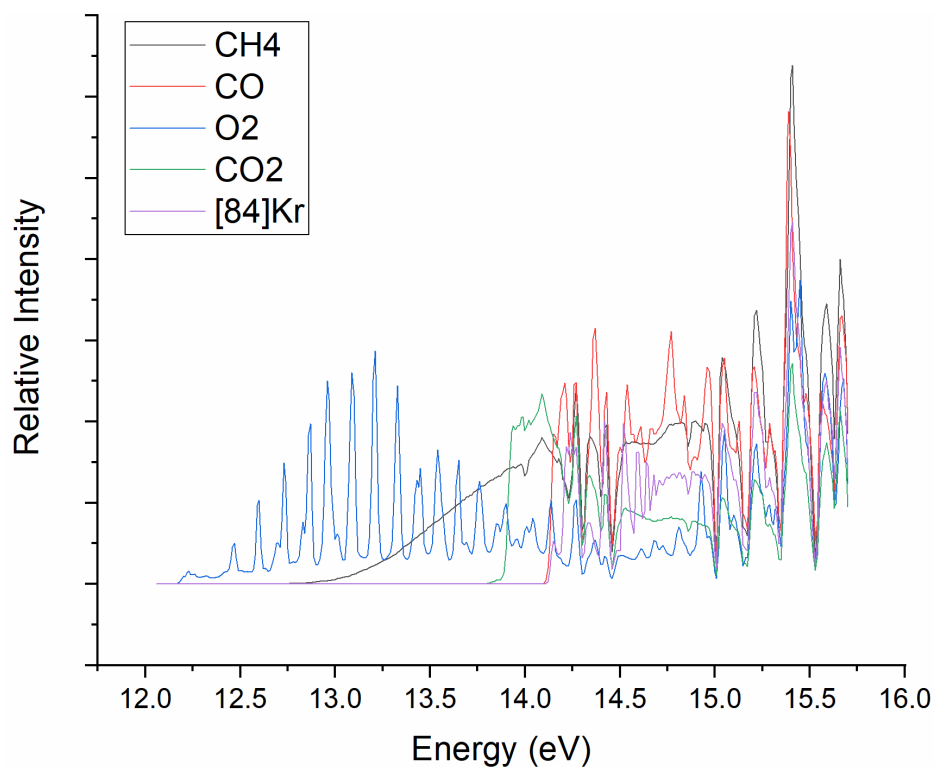


图 2 标准谱（直接除以流强，不考虑量子产率校正，再除以标准光通量）

2.3. 结果对比

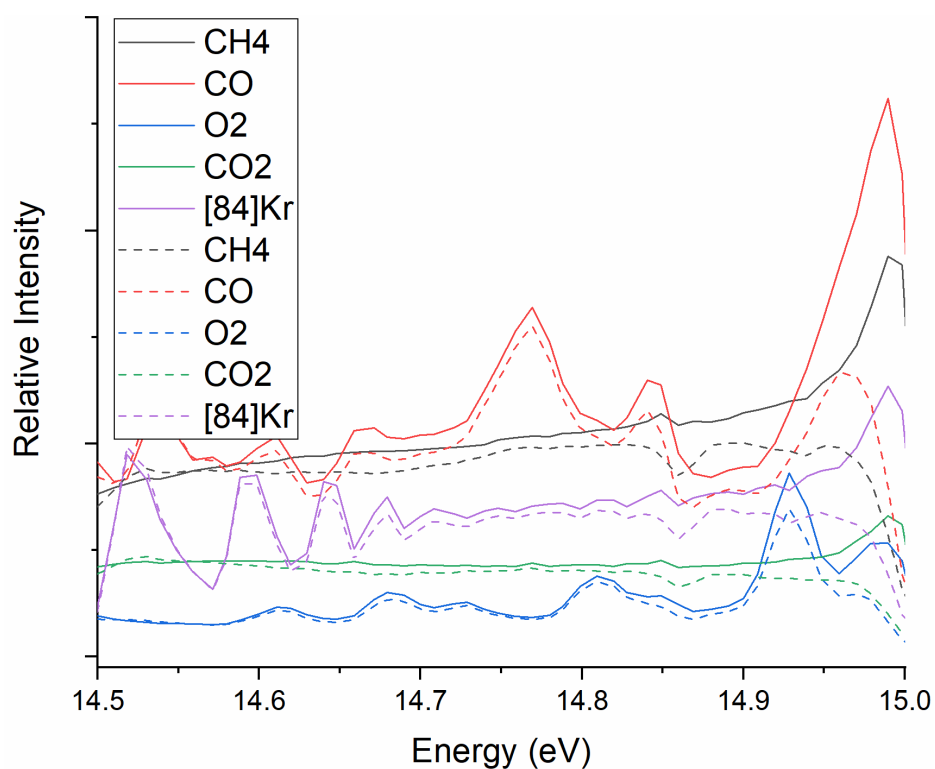


图 3 两种方式处理线型对比

对上述两种方法得到的信号曲线各乘以相应系数，比较线型，略有差异。但在 14.70~14.84 区间，吻合较好，比较适合用于定量计算。

3. 结论

由于 CO、O₂、CO₂、Kr 自电离峰特别多、没有标准光电离截面数据以及光栅步进电机运动回程误差等原因，上述几种物质在高光子能量区间某一个能量的重复性较差。因此，我们采用扫描一段冷气标准谱的实验数据，可用于对 CH₄、CO、O₂、CO₂、Kr 等物种的定量计算，避免了上述误差，更为准确可靠。