

# 合肥国家同步辐射光源软 X 光空间 相干性的数值计算\*

杨绍光 谢行恕 赵永飞 贾成芝

(中国科学技术大学基础物理中心 合肥 230026)

**提要** 提出了计算同步辐射软 X 光空间相干性的方法。根据合肥国家同步辐射光源软 X 光实验站的具体数据,通过数值计算得到了不同针孔半径、不同工作波长时的相干范围,并得到了估计相干范围直径的近似公式。所得结果为软 X 光实验和单色仪的改造提供了具体的数值依据。

**关键词** 波带片-针孔单色仪,软 X 光,空间相干性

## 1 引 言

波长从 2.3~ 4.4 nm 的软 X 光,是所谓“水窗”波段。此波段里的 X 光对水的透过率高于蛋白质等生物物质约一个数量级,为人类研究活的生物细胞提供了良好的物理条件<sup>[1]</sup>。软 X 光全息术和软 X 光层析术<sup>[2-4]</sup>能够在细胞水平上观察生物大分子的三维结构,从而揭示生命的秘密,吸引了众多科学家的广泛兴趣。

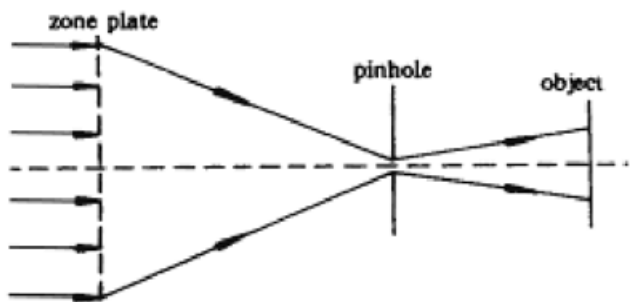


图 1 软 X 光实验光路示意图

合肥国家同步辐射实验室(NSRL)软 X 光实验站利用波带片-针孔单色仪,从同步辐射光中取得软 X 光<sup>[5]</sup>。利用波带片的色散性质,同步辐射光经波带片衍射后,用针孔可以取得带宽很窄的准单色软 X 光。在这里针孔既用于压缩带宽提高光的时间相干性,也用于减小光源的线度提高光的空间相干性。图 1 是软 X 光实验部分光路图。图 1 的左边一半是波带片-针孔单色仪,右边是通过针孔的软 X 光经过一段传播距离后照射样品。国内软 X 光领域的开拓者们曾经估算过软 X 光的空间相干性<sup>[6]</sup>。本文利用数值计算的方法考察了 NSRL 软 X 光的空间相干性,并得到了估算空间相干性的更准确的公式。

Fig. 1 Schematic diagram of the soft X-ray experiment

## 2 空间相干性的一般考虑

取小孔平面为  $(r_0, \theta_0)$ ,物面上相对位置为  $(R, \phi)$ ,针孔到物面的距离为  $L$ 。我们知道通过

\* 合肥国家同步辐射实验室和国家自然科学基金资助课题。

针孔的软 X 光是准单色的, 其带宽远小于工作波长。根据 Van Citter-Zernike 定理, 菲涅耳近似下光的相干系数可以表示为<sup>[7]</sup>

$$|\mu| = \left| \frac{\iint I(r_0, \theta_0) \exp\left[-\left|\frac{i2\pi}{\lambda}\right| \cdot r_0 \cdot \frac{R}{L} \cdot \cos(\theta_0 - \phi)\right] \cdot r_0 \cdot dr_0 d\theta_0}{\iint I(r_0, \theta_0) r_0 \cdot dr_0 d\theta_0} \right| \quad (1)$$

其中积分范围遍及整个针孔平面。在我们的问题里光强具有轴对称性,

$$I(r_0, \theta_0) = I(r_0)$$

根据 Bessel 函数的性质

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-ix \cos(\theta - \phi)] d\theta \quad (2)$$

公式(1)简化为

$$|\mu| = \left| \frac{\int I(r_0) \cdot J_0\left[\frac{2\pi r_0}{\lambda} \cdot \frac{R}{L}\right] \cdot r_0 \cdot dr_0}{\int I(r_0) \cdot r_0 \cdot dr_0} \right| \quad (3)$$

按惯例当  $|\mu| > 0.88$  时可以将光看成是相干的, 而  $|\mu| < 0.88$  时看成是部分相干的。一般估计相干性时将针孔上光强分布假设为均匀分布, 即  $I(r_0)$  为常数。NSRL 软 X 光实验站单色仪现有针孔半径为  $4 \mu\text{m}$ , 针孔到物面距离为  $L = 0.8 \text{ m}$ 。我们以  $3.2 \text{ nm}$  软 X 光为例, 根据公式(3)设计了计算程序, 具体计算了物面上相干范围的直径(简称相干直径)。对于半径为  $4 \mu\text{m}$  的针孔相干直径大约是  $102 \mu\text{m}$ , 如果将针孔半径减小为  $2 \mu\text{m}$ , 则相干直径约为前者的 2 倍。

### 3 单色仪针孔上的光强分布

前面我们把针孔上的光强分布看成均匀的, 实际上由于波带片的衍射针孔上的光强呈某种非均匀分布。下面将通过具体计算得到针孔上的光强分布, 从而精确计算光的相干范围。

软 X 光波带片是一种衍射光学元件, 是由一组透光和不透光相间隔的圆环组成的特殊光栅, 圆环半径满足

$$r_n^2 = n\mathcal{f} + n^2\lambda^2/4 \quad n = 1, 2, 3, \dots, N \quad (4)$$

从公式(4)我们发现对于同一波带片不同波长的光焦距不同, 这就是波带片的色散性质。人们正是利用这个性质使用波带片-针孔单色仪从连续波长的同步辐射光中取得准单色软 X 光。我们知道当波带片到针孔的距离确定时, 波带片对某一波长的光准确聚焦, 焦平面上这种波长的光强呈 Airy 分布。对于其它波长属于离焦情况, 光强的分布有一定的变化。各种波长的光在针孔上强度迭加形成了总的光强分布。

根据光的衍射理论, 从亥姆霍兹-基尔霍夫积分方程出发<sup>[8]</sup>, 通过数值计算可以直接得到光强在针孔上的分布。对于波长为  $\lambda$  的单色光衍射积分公式为

$$u(p_0) = \frac{1}{4\pi} \iint_{\Sigma} \frac{\partial u}{\partial n} \cdot \left[ \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \right] - u \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \right] \Big| ds \quad (5)$$

$\Sigma$  为波带片所有透光的环带,  $u$  代表衍射面上光的复振幅分布,  $u(p_0)$  为复振幅在观察点  $p_0$  的值,  $r_{01}$  为观察点  $p_0$  到  $\Sigma$  面上任一点  $p$  的距离(图 2)。利用基尔霍夫边界条件, 并注意到  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

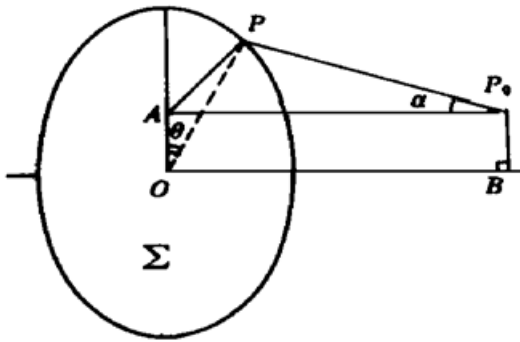


图 2 计算衍射分布的坐标系

Fig. 2 The coordinate system used in the calculation of the distribution of diffraction

$\gg \frac{1}{r_{01}}$ , 可得到

$$u(p_0) = \frac{1}{4\pi} \iint_{\Sigma} \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \left[ \frac{\partial u}{\partial n} - jku \cdot \cos\alpha \right] ds \quad (6)$$

取照明光波为平面波  $u = A \exp(jkz)$ , 在  $\Sigma$  面上取  $z = 0$  则有如下关系

$$u = A \quad \frac{\partial u}{\partial n} = - \frac{\partial u}{\partial z} = - jkA \quad (7)$$

此时, 积分方程变为

$$u(p_0) = \left[ - \frac{jkA}{4\pi} \right] \iint_{\Sigma} \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \cdot (1 + \cos\alpha) ds \quad (8)$$

考虑垂直于光轴的平面上光场的径向分布。柱坐标下, 源点为  $P(r, \theta, 0)$ , 观察点为  $P_0(r_0, 0, z)$ ,  $OP = r, OA = r_0, P_0A = z, P_0P = r_{01}, PA \perp P_0A$

$$r_{01}^2 = (r_0^2 + r^2 + z^2) - 2r_0r \cdot \cos\theta \quad \cos\alpha = z/r_{01}$$

积分方程简化为

$$u(r_0, 0, z) = \left[ - \frac{jkA}{4\pi} \right] \iint_{\Sigma} \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \cdot (1 + \cos\alpha) r dr d\theta \quad (9)$$

从方程(9)出发计算同步辐射光经波带片衍射后光强沿针孔半径的分布(图3)。由于通过针孔的光的带宽很窄, 可以假设各种波长的光以同样的光强入射。同种波长的光衍射后振幅迭加, 不同波长的光在针孔上强度相加。

NSRL 波带片-针孔单色仪的具体数据<sup>[5]</sup>如下所述。

从光源到波带片的距离约为 10 m, 由 0.27 mrad 的同步辐射光照射波带片, 计算时我们可以近似看成平行光入射。现有小孔的半径为 4  $\mu\text{m}$ 。为了消除零级光的影响, 波带片中心放置了直径为 0.3 mm 的光阑。

工作波长	2.3 nm	3.2 nm	4.5 nm
总波带数	1506	1080	770
遮挡波带数	17	12	9
最外环宽度	0.467 $\mu\text{m}$	0.645 $\mu\text{m}$	0.909 $\mu\text{m}$
焦距	566 mm	566 mm	566 mm

根据公式(9)进行数值计算。 $r_0$  步长取 0.01  $\mu\text{m}$ , 得到了光强沿针孔径向的分布(图3)。图中横坐标为到针孔中心的径向距离  $r_0$ , 单位 0.01  $\mu\text{m}$ ; 纵坐标为相对光强  $I$ , 取针孔中心光强为 1。从图中可以清楚地看到, 针孔上光强不是均匀分布, 而是呈中心光强大、沿半径光强迅速减弱的分布。这种光强分布必将对光的相干性产生影响。

### 4 软 X 光的空间相干性

#### 4.1 物面上光的空间相干性

根据公式(3)将上面计算得到的光强代入计算物面上光的相干系数  $|\mu|$ 。图 4 是 3.2 nm 工作波长时的  $|\mu| - R$  曲线。其中横坐标  $R$  表示物面上相对距离, 单位为  $\mu\text{m}$ , 纵坐标代表  $|\mu|$ 。曲线标号 2, 4 代表针孔半径分别为 2  $\mu\text{m}$ , 4  $\mu\text{m}$ 。曲线标号  $a_4$  代表光强均匀分布时半径 4  $\mu\text{m}$

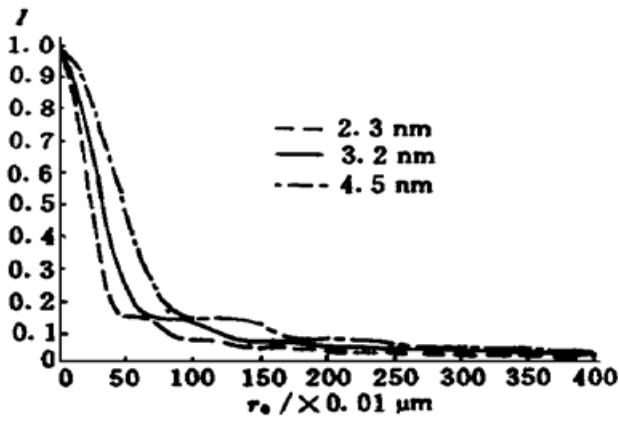


图 3 针孔上光强的径向分布

Fig. 3 Intensity distribution along the radial distance on the pinhole

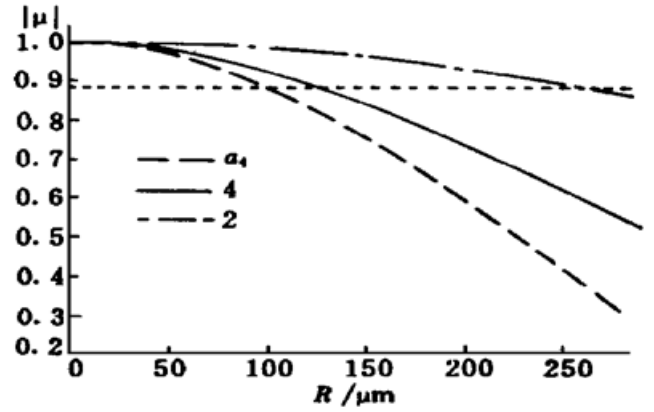


图 4 物平面上光的空间相干性

Fig. 4 Spatial coherence on the object plane

针孔的空间相干性曲线。从三条曲线的比较可以得到: 实际光的空间相干性与光在针孔上均匀分布时相比要好一些。实验工作中需要知道光的相干范围。我们采用  $|\mu| > 0.88$  的标准, 根据我们的计算将 NSRL 软 X 光单色仪三种工作波长时的相干直径列出。计算时取用针孔到物面的距离  $L = 0.80 \text{ m}$ 。

工作波长	2.3 nm	3.2 nm	4.5 nm
光强均匀分布	73 μm	102 μm	143 μm
4 μm 针孔	92 μm	128 μm	182 μm
2 μm 针孔	186 μm	258 μm	363 μm

#### 4.2 相干直径与针孔半径的关系

为了提高软 X 光的相干性, 拟采用更小的针孔。我们计算了物面上相干直径随针孔半径的变化关系。计算时针孔上光强分布采用均匀分布和实际分布两种情况, 结果如图 5 所示。图中横坐标为针孔半径  $a$ , 单位为  $0.01 \mu\text{m}$ ; 纵坐标为相干直径  $D$ , 单位为  $2 \mu\text{m}$ 。可以看到, 一般情况下与光在针孔上均匀分布时相比, 实际上光的空间相干性要好。当针孔半径减小到一定值后, 两种情况的相干直径几乎相同。

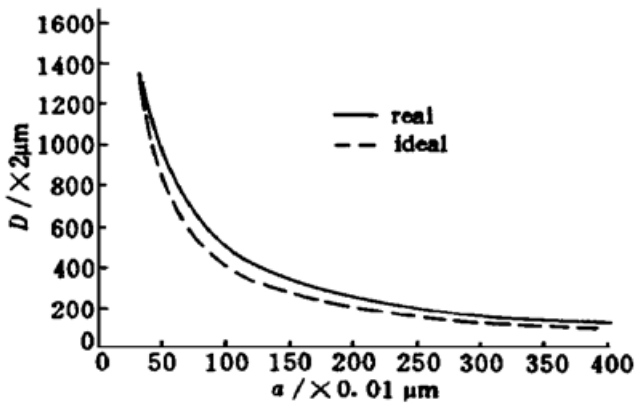


图 5 相干直径与针孔半径的关系

Fig. 5 Relationship between spatial coherence and pinhole's radius

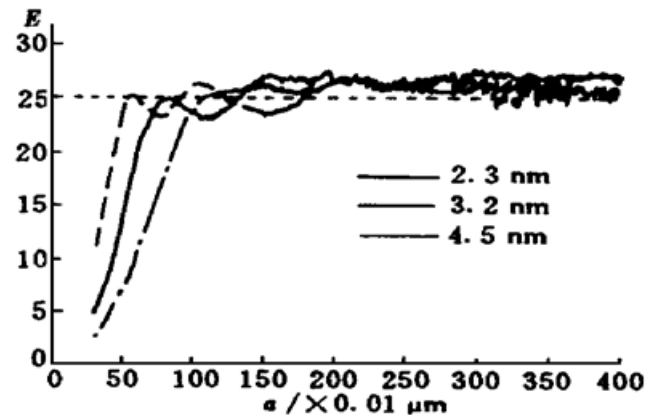


图 6 百分误差与针孔半径的关系

Fig. 6 Relationship between the relative error of the real coherent diameter and ideal coherent diameter and the pinhole's radius

### 4.3 估计相干直径的近似公式

为了便于实际应用,我们把实际的相干直径  $D$  与光强均匀分布时的相干直径  $D_0$  两者之间建立起数值关系。对于 2.3 nm, 3.2 nm, 4.5 nm 三个工作波长,我们计算了相干直径  $D, D_0$  随针孔半径变化的关系。利用所得结果,计算  $\frac{(D - D_0)}{D_0} * 100$  (我们称之为百分误差  $E$ ) 随针孔半径的变化,结果如图 6 所示。图中横坐标为针孔半径  $a$ , 单位为  $0.01 \mu\text{m}$ ; 纵坐标为百分误差  $E$ 。可以看到当针孔半径大于  $1 \mu\text{m}$  (图上横坐标大于 100) 时,百分误差约为 25。当针孔半径小于  $1 \mu\text{m}$  时,百分误差线性地减小。由于技术上的限制和对软 X 光光强的考虑,实际工作中针孔直径大于  $1 \mu\text{m}$ 。可以利用近似式估计光的相干直径  $D \approx D_0 * 125\%$ 。又因为  $D_0 = 0.16L\lambda/a$ , 物面上相干范围的直径可估计为

$$D \approx 0.2 * L\lambda/a$$

其中  $L$  为物面到针孔的距离,  $\lambda$  为工作波长,  $a$  为针孔半径。

**致谢** 感谢陈建文教授的有益讨论及提出的中肯意见;感谢傅绍军教授制造了单色仪的波带片,并为本文的计算提供了有关波带片的准确数据。

### 参 考 文 献

- 1 Xie Xingshu. Soft X-ray microimaging of biological specimens. *Progress in Physics* (物理学进展), 1992, **12**(3) : 333~ 358 (in Chinese)
- 2 M. Howells, C. Jacobsen, J. Kirz *et al.*. X-ray holograms at improved resolution: a study of zymogen granules. *Science*, 1987, **238**(4826) : 514~ 517
- 3 C. Jacobsen, M. Howells, J. Kirz *et al.*. X-ray holographic microscopy using photoresists. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1990, **7**(10) : 1847~ 1861
- 4 I. McNulty, J. Kirz, C. Jacobsen *et al.*. High-resolution imaging by Fourier transform X-ray holography. *Science*, 1992, **256**(5059) : 1009~ 1012
- 5 Su Y. G., Fu S. J., Hong Y. L. *et al.*. Optics on a synchrotron radiation soft X-ray microscopy beam-line and its despersing compnents in Hefei. *Physica Scripta*, 1990, **41** : 793~ 796
- 6 Chen Jianwen, Xu Zhizhan, Zhu Peiping *et al.*. Experimental study on soft X-ray multi-shit interference. *Chinese J. Lasers* (中国激光), 1996, **A23**(8) : 737~ 740 (in Chinese)
- 7 Xie J. P., Ming H.. Introduction to modern optics. Hefei Publication of University of Science and Technology of China, 1990, pp42~ 52 (in Chinese)
- 8 J. W. Goodman. Introduction to Fourier optics. San Francisco : Mcgraw-hill book company, 1968 : 57~ 61

## Calculation of Spatial Coherence of Soft X-Ray at NSRL

Yang Shaoguang Xie Xingshu Zhao Yongfei Jia Chengzhi  
(Center for Fundamental Physics of USTC, China 230026)

**Abstract** The method to calculate the spatial coherence of synchrotron radiation soft X-ray has been put forward. The spatial coherence has been calculated numerically according to the data from a NSRL soft X-ray zone plate-pinhole monochrometor at three working wavelengths. In addition, a formula to calculate the diameter of the coherent area has been concluded. This should be helpful to the soft X-ray experiments and the refinement of the monochrometor at NSRL.

**Key words** soft X-ray, zone plate-pinhole monochrometor, spatial coherence