

# 4~ 120 nm 波段的单色仪光束线设计

吕丽军 王秋平 余小江

(中国科技大学国家同步辐射实验室, 合肥 230026)

**摘 要** 合肥国家同步辐射实验室(NSRL)在表面物理光束线中应用了新的简单平面光栅单色仪作为分光仪器。它采用平面光栅和球面镜组成光学成像系统,波长选择由光栅绕其中心轴转动和球面镜绕一镜面外的轴转动完成。单色仪在 4~ 120 nm 光谱范围内具有高的光学传输效率、高的光谱分辨率。

**关键词** 同步辐射, 单色仪, 光学设计。

## 1 引 言

在合肥国家同步辐射实验室二期改造扩建项目中,需建一条供表面物理实验研究的光束线实验站。实验对光束线提出的主要性能要求是: 1) 工作光谱范围 4~ 120 nm; 2) 光谱分辨率在 6~ 120 nm 约等于 1000; 3) 光子通量高于  $5 \times 10^{10}$  Photons/s; 4) 在样品处的光斑尺寸为 1 mm  $\times$  2 mm 左右。要实现以上性能要求,单色仪的设计是十分关键的。

在 4~ 120 nm 的光谱范围内,典型的单色仪系统是球面光栅单色仪 Dragon<sup>[1]</sup>和平面光栅单色仪 SX-700<sup>[2]</sup>。Dragon 的光学和机械结构方面都比较简单,容易实现高分辨;不足之处是每块光栅调谐范围窄、波长扫描需移动单色仪的出缝而导致后置光学装置的复杂性。SX-700 虽然工作波长范围宽,也可以达到高分辨,但仪器相当复杂,造价昂贵。

从九十年代以来,在 Dragon 和 SX-700 基础上又发展了几种新型单色仪<sup>[3]</sup>,它们在一个或几个方面克服了 Dragon 和 SX-700 的缺点。由 Lu 等发明的简单平面光栅单色系统<sup>[4]</sup>就是其中的一种。它应用平面光栅和球面反射镜组成单色仪光学系统,波长扫描由光栅绕其中心轴转动以及前置球面镜绕一镜面外的轴转动来完成;这些技术较容易实现。它具有 SX-700 单色仪的优点:宽的工作光谱范围、高的光通量;但光学上比 SX-700 简单,且具有很好的高级次抑制性能。本文将主要讨论光束线的光学系统设计,并给出了系统主要性能的计算结果。

## 2 光束线光学设计

### 2.1 单色仪系统

单色仪的工作原理如图 1 所示。由入缝发出的光束先由球面镜聚焦,焦点位于平面光栅

之后, 焦距由球面镜的聚焦方程决定。

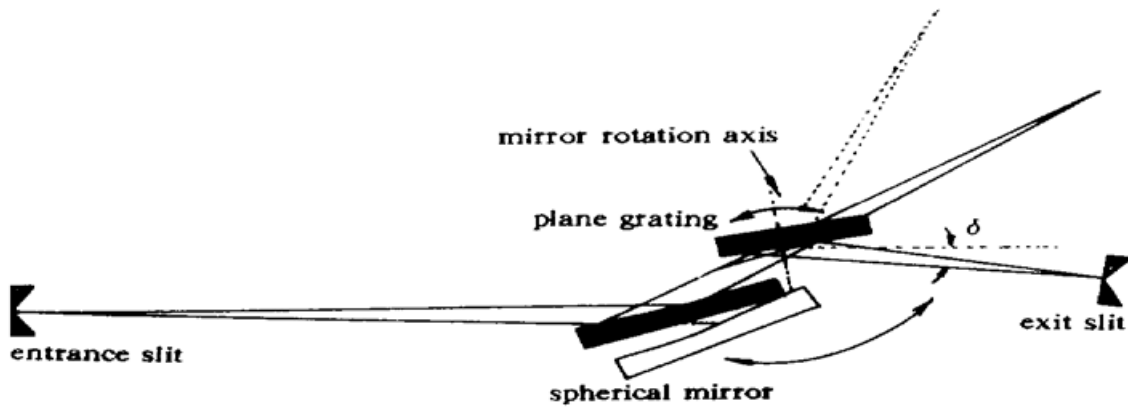


Fig. 1 Optical scheme of the monochromator with a spherical mirror in front of a plane grating. The two positions drawn provide two different wavelengths

球面光栅的聚焦方程由 Namioka<sup>[5]</sup>应用光程函数方法导出:

$$\frac{\sin^2 \alpha}{r} + \frac{\sin^2 \beta}{r'} = \frac{\sin \alpha + \sin \beta}{R}, \quad (1)$$

式中,  $r$ 、 $r'$  为光栅的物距和像距,  $\alpha$ 、 $\beta$  为掠入、出射角,  $R$  为光栅的曲率半径。对于球面反射镜  $\alpha = \beta$ , 由(1) 式可得球面镜的像距  $r'_m$  为

$$r'_m = \left( \frac{2}{R \sin \theta} - \frac{1}{r_m} \right)^{-1}, \quad (2)$$

其中  $\theta$  为光束在镜子上的掠入射角, 镜子离光源的距离  $r_m = r_0 - L_0 / \tan 2\theta$ ,  $r_0$  为沿入射光线方向光栅到入缝的投影距离,  $L_0$  为光栅到入射光线的垂直距离。

入射至平面光栅上的是一会聚光束。光栅将光束色散并聚焦于单色仪的出缝处。只要把  $R = \infty$  代入(1) 式中它就成为平面光栅的聚焦方程, 从而得到焦距  $r'_g$  为

$$r'_g = - \left( \frac{\sin \beta}{\sin \alpha} \right)^2 r_g, \quad (3)$$

公式中的  $r_g = -r'_m + L_0 / \sin 2\theta (< 0)$  是光栅的物方焦距,  $\alpha$ 、 $\beta$  为光线在光栅上的掠入、出射角。若出射光束相对于入射光束方向沿顺时针方向偏离  $\delta$ , 则有  $2\theta = \alpha + \beta - \delta$ 。另外, 光线还必须满足光栅方程:

$$\cos \alpha - \cos \beta = Nk\lambda, \quad (4)$$

其中,  $N$  为光栅的刻槽密度,  $k$  为光谱级次。

这个单色仪的工作原理是通过转动球面镜以改变光束在光栅上的入射角并同时转动光栅使上述聚焦方程(2)、(3)和光栅方程(4)在整个工作波段内都满足, 这个单色仪也属于变包含角单色仪。为了使光束经过转动的球面镜反射后在光栅上的入射位置不变, 镜子运动方式可能有两种: 镜子绕其中心轴转动并同时沿入射光线方向平移或镜子绕着一镜面外的轴转动。在超高真空条件下, 选择后者比较简单可靠, 这种机构已在 SX-700 及其它变包含角单色仪中得到成功的应用。

这个单色仪有三个特点, 首先, 使用具有简单面形的球面镜和平面光栅, 光学元件容易加工, 面形精度(slope error)一般可以达到 0.2 arc second(RMS 值), 这是实现高的光谱分辨率的关键。第二, 单色仪系统在工作波段内完全满足消离焦条件, 主要影响分辨率的系统像差是彗差。彗差是与成像光束孔径的平方成正比的, 在 4~ 120 nm 波段, 单色仪系统的彗差

对通常利用的同步辐射光源的接收孔径来说是比较小的。第三, 光栅的衍射效率性能基本上取决于与光线的掠入射角  $\alpha$  (负光谱级次是  $\beta$ ) 的关系, 这种关系曲线叫光栅效率的工作曲线。作者发现应用 -1 级光谱时光栅的工作效率曲线的斜率取决于单色仪入射臂和出射臂长度之比  $r_0/r'_g$ ; 曲线的纵坐标值 ( $\beta$ ) 范围取决于球面镜的曲率半径。因此只要选择合适的单色仪参数就可以优化光栅的效率工作曲线, 使光栅可以覆盖很宽的工作波长范围和较理想的高次谐波抑制性能<sup>[4]</sup>。同时球面镜也具有高次谐波抑制作用。这种特性是一般球面光栅单色仪所不具备的。经过计算, 选单色仪的入射臂长  $r_0 = 4.5$  m, 出射臂长  $r'_g = 1.5$  m; 应用两块前置球面镜  $SM_1$  ( $R_1 = 65$  m)、 $SM_2$  ( $R_2 = 11$  m) 和两块平面光栅  $G_1$  (1200 l/mm)、 $G_2$  (400 l/mm)。  $G_1$  和  $SM_1$  组合覆盖 4~ 15 nm,  $G_2$  和  $SM_1$  组合覆盖 12~ 45 nm,  $G_2$  和  $SM_2$  组合覆盖 39~ 120 nm。

此单色仪光束线接在合肥同步辐射装置的储存环上, 仪器要求超高真空, 光学元件的运动和调整都必须通过动密封传动机构来实现。对于两块光栅的互相更换, 把两块光栅并列地放在垂直于光束入射面方向的滚珠导轨上, 用真空线性馈入装置选择光栅。但对于前置球面镜, 采用的设计是将两块球面镜沿入射光线方向并列放在同一基板上(图 2), 步进电机驱动基板实现镜子转动。只要基板绕它们的转轴旋转一适当角度, 射至  $SM_1$  上的光束就可以过渡到  $SM_2$  镜子上。在 SX-700 中, 应用几何关系确定平面前置镜的转轴位置可选择在三个工作角度(波长)使光束处在光栅中心<sup>[6]</sup>, 在其余工作角度保持光束偏移中心很小。在作者设计的单色仪中, 其中两个工作角度就选在使光束处在两块球面镜的中心所对应的角度, 第三个取它们的平均值。

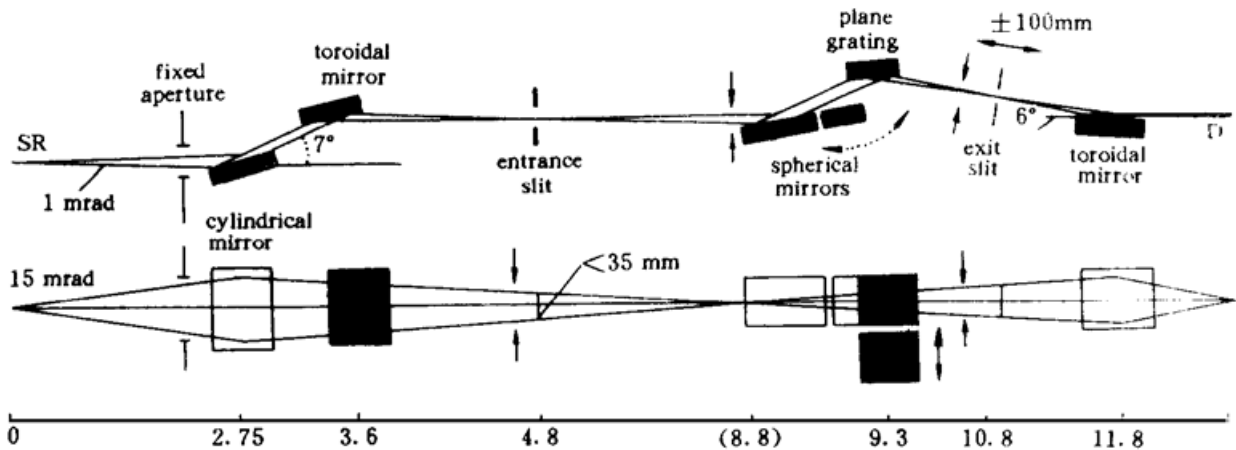


Fig. 2 Optical design of the beamline. It shows at the bottom the distance of each optical component from the SR source, unit: m

## 2.2 前置、后置光学系统

在单色仪和同步辐射(SR)光源之间需设计一前置光学系统。在单色仪的色散平面(垂直平面)内, 它把同步辐射光源聚焦于单色仪的入缝, 并使光源和单色仪的接收能力相匹配; 在水平面内, 它协同后置光学装置把同步光源以一定的缩比聚于样品上。在以前的该波段范围的光束线设计中, 人们通常采用 Kirkpatrick-Baez 光学装置<sup>[7]</sup>, 它采用两块相互垂直放置的柱面镜分别对同步辐射光束的水平 and 垂直聚焦, 分离聚焦使系统不会产生像的弯曲(消像散、彗差), 便于调试。但主要缺点是要求水平聚焦镜的尺寸很大。譬如, 镜子离光源 3.5 m, 光

束的水平发散角 10 mrad, 并以 3°的掠入射角打在镜子上, 那么镜子长度要求大于 700 mm, 这样的同步辐射光学反射镜十分昂贵。在这条光束中, 采用了共面柱面-环面反射镜系统<sup>[8]</sup> (图 2)。两块镜子都是水平放置, 由于同步辐射在此波段有效垂直发散角较小 (~ 1 mrad), 所以只需比较小尺寸的镜子 (~ 100 mm)。这样的镜子加工、真空系统及机械装置都简单。此系统的设计原理是通过选择合适的镜子曲率半径使柱面镜和环面镜的像散彗差相消, 这个条件导致了环面镜的水平物距  $r_{s2}$  必须由下面公式确定<sup>[8]</sup>,

$$r_{s2} = \frac{(K + 1)r_{s2}'^2}{2r_{m2} - (K - 1)r_{s2}'}, \quad (5)$$

其中  $K = r_{m2}/r_{s2}'$  为光学系统的垂直成像比,  $r_{m2}$ 、 $r_{s2}'$  是环面镜的垂直物距和水平像距。

在通用亮度运行模式下, 同步辐射光源的垂直和水平横向分布近似为高斯分布, 其  $\sigma_{\perp} = 0.102$  mm,  $\sigma_{\parallel} = 0.9667$  mm; 取  $3\sigma_{\perp}$  和  $3\sigma_{\parallel}$  作为光源的有效尺寸。若要求单色仪光谱分辨率为 ~ 1/1000 时, 入缝需开启大约 100  $\mu\text{m}$ 。因此作者设计前置光学系统的垂直缩放比  $K = 3$ 。光束线的前端装置安排决定了柱面镜的物距  $r_{m1} = 2.75$  m, 两块镜子之间的距离设计为  $r_{12} = 0.85$  m。在水平方向, 前置光学系统的水平焦点设计在入缝后 4 m 处(单色仪的前置球面镜前), 环面镜到入缝的距离为 1.2 m, 即  $r_{s2}' = 5.2$  m。这样由(5)式就可以计算出  $r_{s2} = -33.8$  m。前置光学系统的水平成像缩比约为 0.5。综合考虑反射率以及像差和镜子尺寸的因素, 设计光束在两块镜子上的入射角为 86.5°。根据垂直和水平聚焦方程就可以确定镜子的曲率半径。

Table 1. Parameters of optical elements in the beamline

	shape	parameter	deviation angle	fig. accuracy /(RMS value)	dimension/(mm <sup>3</sup> )
prefocusing (1) optics	cylinder	$\rho = 311.078$	173°	1.0 sec	140×65×25
(2)	toroid	$R = 29485$ $\rho = 750.342$	173°	1.0 sec	140×65×25
premirror of (1) monochromator	spherical	$R = 65000$	169.4°~ 173.2°	0.2 sec	266×40×40
(2)	spherical	$R = 11000$	142.4°~ 149.9°	0.2 sec	57×30×20
grating (1)	plane	$N = 1200$ l/mm $\theta_b = 1.8^\circ$	163.4°~ 167.2°	0.2 sec	120×30×25
(2)	plane	$N = 400$ l/mm $\theta_b = 2.00$	136.4°~ 143.9°	0.2 sec	120×30×25
postfocusing optics	toroid	$R = 19107$ $\rho = 78.504$	174°	1.0 sec	140×65×25

In table 1,  $R$ : meridian curvature radius;  $\rho$ : sagittal curvature radius;  $N$ : grating density;  $\theta_b$ : grating blaze angle.

作者在单色仪后面应用一环面反射镜作为后置光学系统。在垂直方向, 从单色仪出来的单色光束由环面镜以 1·1 聚焦到样品上。在水平方向, 环面镜把上述前置系统的水平焦点以 3·1 的缩比聚于样品上。这样整条光束线的水平缩放比为 1.5。

光束线的光路如图 2 所示, 光束线的光学元件参数由表 1 给出。所有光学元件的基底材

料为熔石英, 光学表面粗糙度要求小于 1 nm, 光学表面镀金。

### 3 光学系统的性能

#### 3.1 单色仪系统的分辨率

在单色仪系统参数确定后, 分辨率主要取决于单色仪入、出射狭缝的开启宽度、光学元件的面形精度、系统的像差。各因素对仪器光谱分辨的贡献分别由以下公式计算:

$$\Delta\lambda_{\text{slit1}} = \frac{\Delta S_1 \sin \alpha}{N r_m} \left( \frac{r_m}{r_g} \right), \quad (6)$$

$$\Delta\lambda_{\text{slit2}} = \frac{\Delta S_2 \sin \beta}{N r_g'}, \quad (7)$$

$$\Delta\lambda_{\text{slope}} = \sqrt{\Delta\lambda_{\text{slope1}}^2 + \Delta\lambda_{\text{slope2}}^2} = \frac{97}{N} \sqrt{[\sin \alpha \sigma_m \left( \frac{r_m}{r_g} \right)]^2 + (\sin \theta \sigma_g)^2}, \quad (8)$$

$$\Delta\lambda_{\text{coma}} = \frac{1.8 \sin \alpha r_m^2 f_{300}}{16N} \theta_v^2, \quad (9)$$

$$f_{300} = \frac{1}{\tan \theta} \left( \frac{1}{r_m'} - \frac{1}{r_m} \right) + \frac{2r_g}{r_m^3 \sin \alpha} (\cos \beta - \cos \alpha),$$

其中  $\theta_v$  为单色仪的垂直接收角,  $\Delta S_1$  为单色仪入缝宽度,  $\Delta S_2$  为单色仪出缝宽度,  $\sigma_m$ 、 $\sigma_g$  为球面镜和光栅的面形精度(FWHM 值)。仪器总的光谱分辨  $\Delta\lambda_{\text{total}}$  为以上所有贡献的平方和的开方,

$$\Delta\lambda_{\text{total}} = \sqrt{\Delta\lambda_{\text{slit1}}^2 + \Delta\lambda_{\text{slit2}}^2 + \Delta\lambda_{\text{slope}}^2 + \Delta\lambda_{\text{coma}}^2}, \quad (10)$$

如果  $\Delta S_1 = 100 \mu\text{m}$ ,  $\Delta S_2 = 80 \mu\text{m}$ ,  $\sigma_m = \sigma_g = 0.5 \text{ arc second}$  和  $\theta_v = 3 \text{ mrad}$ , 系统分辨率 ( $\Delta\lambda/\lambda$ ) 如图 3 所示。从图中可以看出, 在 6~120 nm 范围内的光谱分辨率的倒数在 1000~2000 左右。如把入、出射狭缝和孔径光阑开窄, 光谱分辨可提高, 但光通量会降低一些。

#### 3.2 光束线系统的效率

光束线的光学传输效率主要取决于光学元件的传输效率: 包括镜子的反射率、光栅衍射效率  $\epsilon_g$ 、光束线系统对光源的几何接收率  $\epsilon_{\text{ac}}$ 。光束线的传输效率是以上各因素的乘积:

$$\epsilon = \epsilon_g \epsilon_{\text{ac}} \eta_{\text{CM}} \eta_{\text{TM1}} \eta_{\text{SM}} \eta_{\text{TM2}} \quad (11)$$

$\eta_{\text{CM}}$ 、 $\eta_{\text{TM1}}$ 、 $\eta_{\text{SM}}$ 、 $\eta_{\text{TM2}}$  分别表示光束线中前置柱面镜和环面镜、单色仪中的球面镜和后置环面镜的反射率。在单色器的工作波段, 一般采用金作为光学元件的镀层材料; 并要求在超高真空下镀膜。另外镜面的光学表面粗糙度是影响反射率的重要因素, 一般要求光学元件达到 ~ 1 nm 的光洁度。通常用 Debye-Waller 公式来估计表面粗糙度对反射率  $\eta$  的影响:

$$\eta = \eta_0 \exp \left[ - \left( \frac{4\pi\sigma \sin \theta}{\lambda} \right)^2 \right] \quad (12)$$

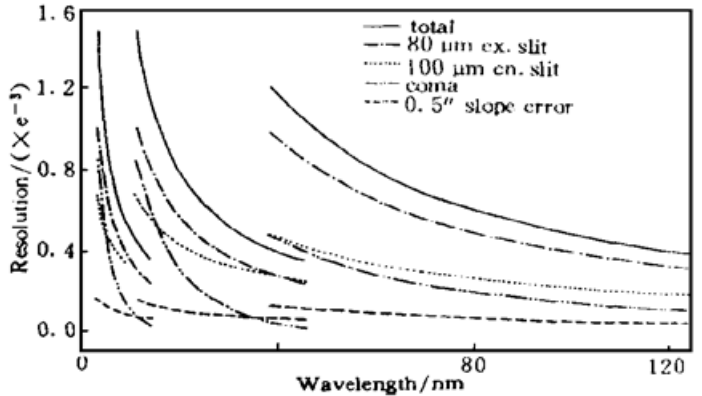


Fig. 3 Spectral resolution of the monochromator. The entrance- and exit-slit widths are 100, 80  $\mu\text{m}$ , respectively; the figure slope error of the grating and the spherical mirror are 0.5 arc second (FWHM). The vertical acceptance of the monochromator is 3 mrad

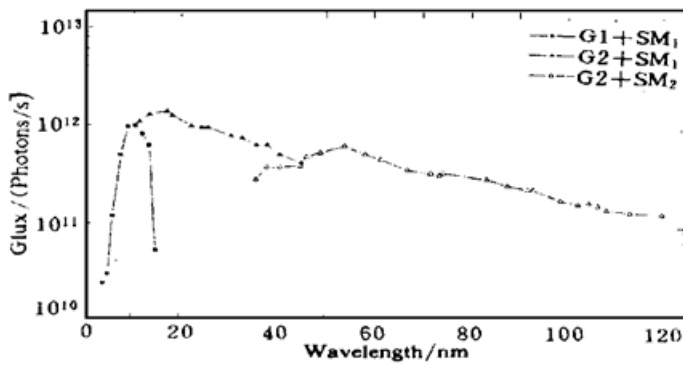


Fig. 4 Calculated photon flux at the sample position (0.1% b. w.). Assuming the surface roughness of all optical elements in the beamline is 2 nm

$\eta_0$  为理想光滑表面的反射率,  $\lambda$  为波长,  $\sigma$  为表面粗糙度(RMS 值),  $\theta$  为光线的掠入射角。在本设计中, 光线在镜子上的掠入射角都较小( $3.5^\circ$ 或 $3^\circ$ ), 这样可减小表面粗糙度对反射率的影响。应用菲涅耳公式计算镜子的反射率, 应用 Nevier 的微分理论<sup>[9]</sup>计算光栅的衍射效率; 金的光学常数引自参考文献[10]。光束线对光源的几何接收率指由于孔径光阑和单色仪狭缝遮挡后的光线透过率, 可以应用光线追迹程序 SHADOW<sup>[11]</sup>计算。图 4 给出了在考虑以上各种因素后得到的

的实验样品处光通量的理论计算值, 假定所有光学元件表面的粗糙度  $\sigma = 2 \text{ nm}$ 。在整个工作光谱范围内, 光谱分辨率为  $\sim 1/1000$  时, 光通量基本都在  $5 \times 10^{10} \text{ photons/s}$  以上。

### 3.3 光束线的光线追迹

在 4~120 nm 波段, 反射镜或光栅只有工作在掠入射下才能获得足够高的反射率, 但掠入射光学结构常会导致严重的系统像差。单色仪光束线一般是由许多块反射镜和光栅组成, 因此整个系统的成像实际上是十分复杂的。而且光束线的投资很大, 在最后实施之前必须应用光学追迹方法对系统作精确的像质评价。

作者利用光线追迹程序 SHADOW 对同步光源辐射光源、光束线光学系统作了精确的成像模拟, 从而对单色仪的光谱分辨率、光学元件的成像像差、孔径光阑和单色仪狭缝对光束的遮挡等都作了详细的验证和计算。追迹模拟结果和像差分析预期的基本一致。图 5 给出了 10 nm、10.006 nm 两条谱线在单色仪出缝平面的光谱分布。很显然这两条谱线已完全分开, 其光谱分辨 ( $\Delta\lambda/\lambda$ ) 为 0.0006, 和图 3 中解析结果基本一致。

若单色仪的出缝开启 80 mm, 光束经过后置环面镜聚焦在样品处形成的像(图 6), 束斑大小约为  $1 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ 。总的光线条数是 4000 条, 由于光束线中的狭缝和光阑的遮挡, 几何光线损失为 2085 条, 比例为 52%。样品处的光斑离地面高度为 1.271 m, 符合实验要求。

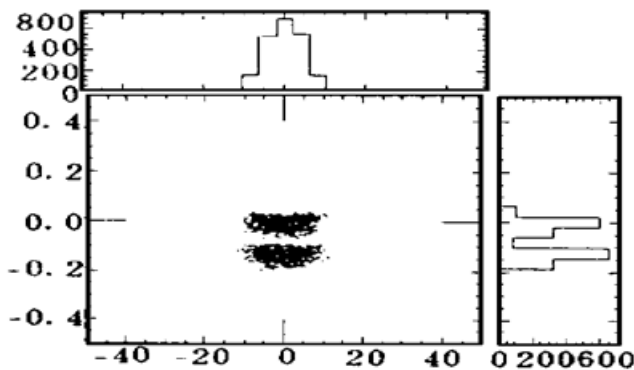


Fig. 5 The dispersing image of 10 nm and 10.006 nm at the exit-slit plane of the monochromator. The vertical and horizontal acceptance of the beamline are 1 and 15 mrad; the entrance slit opening is  $100 \mu\text{m}$

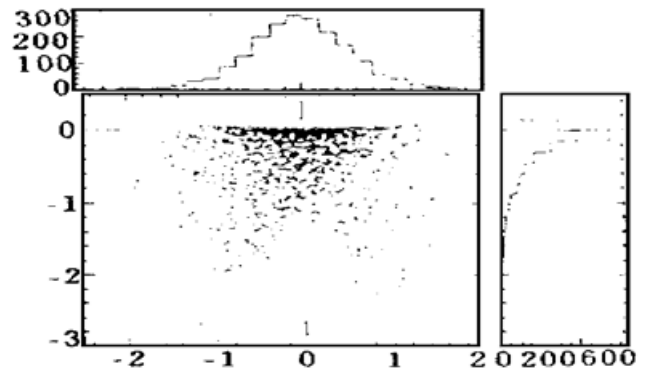


Fig. 6 The spot diagram at the sample position

## 参 考 文 献

- [1] C. T. Chen. Concept and design procedure for cylindrical element monochromators for synchrotron radiation. *Nucl. Instrum. and Meth. (A)*, 1987, **256** : 595~ 603
- [2] H. Petersen. The plane grating and elliptical mirror: a new optical configuration for monochromators. *Opt. Commun.*, 1982, **40**(6) : 402~ 406
- [3] H. A. Padmore, Warwick. Soft x-ray monochromators for third-generation undulator sources. *J. Syn. Rad.*, 1995, **1** : 27~ 36
- [4] L.-J. Lu, D. Coco, W. Jark. Simple plane grating monochromator for synchrotron radiation. *Nucl. Instrum. Meth. (A)*, 1994, **339** : 604~ 609
- [5] T. Namioka. The theory of the concave grating. *J. Opt. Soc. Am.*, 1959, **49** : 446~ 460
- [6] A. V. Pimpale, S. K. Deshpande, V. G. Bhide. Design considerations for the rotation of a plane pre-mirror of a monochromator for reflecting synchrotron radiation onto the same spot of the dispersing grating of the XUV beamline. *Appl. Opt.*, 1991, **30** : 1591~ 1594
- [7] P. Kirkpatrick, A. V. Baez. Formation of optical images by x-rays. *J. Opt. Soc. Am.*, 1948, **38** : 766~ 774
- [8] L.-J. Lu. Prefocusing optics for soft x-ray synchrotron radiation monochromators. *Appl. Opt.*, 1996, **35**(19) : 3627~ 3634
- [9] M. Neviere, P. Vincent, R. Petit. Sur la theorie reseau conducteur et ses applications a l'optique. *Nouv. Rev. Opt.*, 1974, **5** : 65~ 76
- [10] Edward D. Palik (ed.). *Handbook of Optical Constants of Solids*, 1985 : 286~ 295
- [11] B. Lai, F. Cerrina. SHADOW: A synchrotron radiation ray tracing program. *Nucl. Instrum. Meth. (A)*, 1986, **246** : 337~ 341

## Monochromator Beamline Design at 4~ 120 nm Spectral Range

Lu Lijun      Wang Qiuping      Yu Xiaojiang

(National Synchrotron Radiation Lab., University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

(Received 2 July 1997; revised 8 January 1998)

**Abstract** A new plane grating monochromator is used in the surface-physics beamline at the Hefei National Synchrotron Radiation Lab. (NSRL) as its light-dispersing instrument. Its optical imaging system consists of a plane grating and a spherical mirror. The wavelength tuning is performed by rotating the pre-spherical mirror around an axis outside of the surface while rotating the grating around its center. The monochromator offers high optical transmission and high spectral resolving power at 4~ 120 nm wavelength range.

**Key words** synchrotron radiation, monochromator, optical design.