

平面变栅距光栅的原理及设计

王 炜 杨厚民

(中国科学院长春光学精密机械研究所, 长春 130022)

摘 要 从光程函数出发, 研究了平面变栅距光栅的聚焦及消像差原理, 并据此设计了用于软 X 射线波段的变栅距光栅。用光线追迹程序对所设计的变栅距光栅进行了性能模拟计算。结果表明, 此光栅具有良好的聚焦性能。

关键词 变栅距光栅, 软 X 射线, 聚焦, 模拟计算。

1 引 言

衍射光栅作为光谱仪的色散元件, 对光谱仪的质量起着举足轻重的作用。在众多的光谱仪中, 平面光栅单色仪(PGM) 由于适用范围宽, 分辨率高, 出射光强度高而受到人们的重视。传统的平面光栅单色仪通常使用等栅距平面光栅和准直镜、聚光镜等辅助元件。为了提高光谱质量, 准直镜和聚光镜通常由长焦距的离轴抛物面、椭球面或超环面构成。加工此类高精度的非球面是非常困难的, 成本也很昂贵; 另外, 真空紫外及软 X 射线辐射会被大多数物质强烈吸收, 因此在光谱仪中要尽量减少反射表面, 以提高光通量。

变栅距(VLS) 光栅(平面或凹面) 本身具有聚焦和消像差性能, 可同时作为色散元件和聚焦元件使用, 因此, 它特别适用于真空紫外及软 X 射线波段。国际上很多研究人员对变栅距光栅的制作和应用都进行了广泛的研究^[1-3], 但目前只有日本能用机械刻划方式制作此类高质量的光栅^[1, 4], 国内尚未见有类似报道。因此, 研究变栅距光栅的原理、设计及制作方法是很有意义的。

2 原 理

本文讨论的变栅距光栅是在平面毛坯上用机械刻划方式制作的反射光栅。此类光栅的基本原理已由 Itou 等人研究过^[5], 但本文的讨论有两点与之不同:

1) 在 Itou 等人的研究中, 光源位于主平面(xOy 平面) 内, 本文对此做了推广, 光源可位于主平面外任意点。2) Itou 等人的结果实质上是在凹面光栅理论的基础上, 令凹球面的曲率半径 $R = \infty$ 得到的。本文则是由光程函数的 k 阶麦克劳林(Maclaurin) 公式直接得到的。

参照图 1 建立直角坐标系, 设光栅中心为坐标原点 O , x 轴的方向为原点 O 处的光栅法线方向, y 轴垂直于光栅刻槽方向, z 轴平行于光栅刻槽方向。设 $A(x_1, y_1, z_1)$ 为一个点光源,

点 $B(x_2, y_2, z_2)$ 为对应的像点, $P(0, y, z)$ 为从原点 O 开始数的第 n 条刻线上的一点。

对应于光线 APB 的光程函数 F 可以写成

$$F = \overline{AP} + \overline{PB} + nm\lambda \quad (1)$$

其中 m 表示衍射级次, λ 表示波长, \overline{AP} 和 \overline{PB} 分别表示 AP 和 PB 的距离, 对平面光栅而言, \overline{AP} 和 \overline{PB} 均为 y 、 z 的函数。

平面变栅距光栅的刻槽数 n 与刻槽位置 y 的关系有不同的表示方法^[5, 6], 本文采用 Itou 等人的数学模型^[5], 令

$$n = f(y) = (y + b_2y^2 + b_3y^4 + b_4y^4 + \dots)/d_0 \quad (2)$$

式中 d_0 为名义光栅常数(原点 O 处的光栅常数), b_2 、 b_3 、 b_4 为栅距变化控制参数(刻划参数)。

由于光程函数 F 是 y 和 z 的函数, 因此, 可用 k 阶麦克劳林公式来表示它

$$F(y, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z})^k F(0, 0) \quad (3)$$

光程函数 $F(y, z)$ 的 k 阶麦克劳林公式的展开结果可以写成下式的形式

$$F(y, z) = \sum_{i,j=0}^k y^i z^j F_{ij} \quad (4)$$

在光栅实际应用中, \overline{AP} 和 \overline{PB} 远大于 y 、 z 、 z_1 和 z_2 , 因此, 四次方以上项的值很小, 对计算的影响微不足道, 可以忽略, 故取 $k = 4$ 。

设 s_1 和 s_2 分别为光源和像点到光栅中心的距离, 则(4) 式中的各 F_{ij} 可分别表示如下

$$F_{00} = s_1 + s_2 \quad (5)$$

$$F_{10} = - \left(\frac{y_1}{s_1} + \frac{y_2}{s_2} \right) + \frac{m\lambda}{d_0} \quad (6)$$

$$F_{01} = - \left(\frac{z_1}{s_1} + \frac{z_2}{s_2} \right) \quad (7)$$

$$F_{20} = \frac{1}{2} \left(\frac{s_1^2 - y_1^2}{s_1^3} + \frac{s_2^2 - y_2^2}{s_2^3} \right) + \frac{b_2 m \lambda}{d_0} \quad (8)$$

$$F_{02} = \frac{1}{2} \left(\frac{s_1^2 - z_1^2}{s_1^3} + \frac{s_2^2 - z_2^2}{s_2^3} \right) \quad (9)$$

$$F_{11} = - \frac{y_1 z_1}{s_1^3} - \frac{y_2 z_2}{s_2^3} \quad (10)$$

$$F_{30} = \frac{1}{2} \left[\frac{y_1(s_1^2 - y_1^2)}{s_1^5} + \frac{y_2(s_2^2 - y_2^2)}{s_2^5} \right] + \frac{b_3 m \lambda}{d_0} \quad (11)$$

$$F_{03} = \frac{1}{2} \left[\frac{z_1(s_1^2 - z_1^2)}{s_1^5} + \frac{z_2(s_2^2 - z_2^2)}{s_2^5} \right] \quad (12)$$

$$F_{21} = \frac{1}{2} \left[\frac{z_1(s_1^2 - 3y_1^2)}{s_1^5} + \frac{z_2(s_2^2 - 3y_2^2)}{s_2^5} \right] \quad (13)$$

$$F_{12} = \frac{1}{2} \left[\frac{y_1(s_1^2 - 3z_1^2)}{s_1^5} + \frac{y_2(s_2^2 - 3z_2^2)}{s_2^5} \right] \quad (14)$$

$$F_{40} = - \frac{1}{8} \left[\frac{1}{s_1^3} \left(1 - 6 \frac{y_1^2}{s_1^2} + \frac{5y_1^4}{s_1^4} \right) + \frac{1}{s_2^3} \left(1 - 6 \frac{y_2^2}{s_2^2} + \frac{5y_2^4}{s_2^4} \right) \right] + \frac{b_4 m \lambda}{d_0} \quad (15)$$

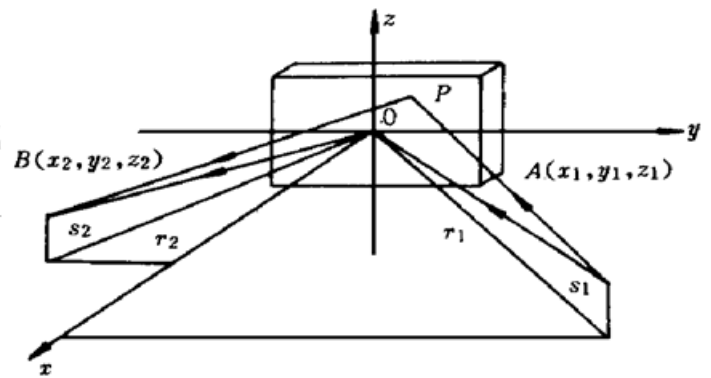


Fig. 1 Schematic diagram of grating system

$$F_{04} = -\frac{1}{8} \left[\frac{1}{s_1^3} \left(1 - 6 \frac{z_1^2}{s_1^2} + \frac{5z_1^4}{s_1^4} \right) + \frac{1}{s_2^3} \left(1 - 6 \frac{z_2^2}{s_2^2} + \frac{5z_2^4}{s_2^4} \right) \right] \quad (16)$$

$$F_{31} = \frac{1}{2} \left[\frac{y_1 z_1}{s_1^5} \left(3 - \frac{5y_1^2}{s_1^2} \right) + \frac{y_2 z_2}{s_2^5} \left(3 - \frac{5y_2^2}{s_2^2} \right) \right] \quad (17)$$

$$F_{13} = \frac{1}{2} \left[\frac{y_1 z_1}{s_1^5} \left(3 - \frac{5z_1^2}{s_1^2} \right) + \frac{y_2 z_2}{s_2^5} \left(3 - \frac{5z_2^2}{s_2^2} \right) \right] \quad (18)$$

$$F_{22} = -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{s_1^3} \left(1 - \frac{3y_1^2}{s_1^2} - \frac{3z_1^2}{s_1^2} + \frac{15y_1^2 z_1^2}{s_1^4} \right) + \frac{1}{s_2^3} \left(1 - \frac{3y_2^2}{s_2^2} - \frac{3z_2^2}{s_2^2} + \frac{15y_2^2 z_2^2}{s_2^4} \right) \right] \quad (19)$$

若令 $F_{ij} = C_{ij} + \frac{m\lambda}{d_0} M_{ij}$, 其中 C_{ij} 为传统等栅距光栅的像差系数, M_{ij} 为像差修正系数, 并引进柱坐标系

$$\begin{aligned} x_1 &= r_1 \cos \alpha, & y_1 &= r_1 \sin \alpha, & z_1 &= z_1, \\ x_2 &= r_2 \cos \beta, & y_2 &= r_2 \sin \beta, & z_2 &= z_2 \end{aligned}$$

α 和 β 分别为主光线的入射角和衍射角, r_1 和 r_2 分别为光源和像点到光栅中心的距离在主平面上的投影, 且使光源和像点位于主平面内 ($z_1 = z_2 = 0$), 即可得到 Itou 等人的结果^[5]。

3 设 计

由(2)式可以得到栅距 d 与刻槽位置 y 的关系

$$d = d_0 / (1 + 2b_2 y + 3b_3 y^2 + 4b_4 y^3 + \dots) \quad (20)$$

变栅距光栅的设计, 实质上是确定合适的栅距变化参数 b_2 、 b_3 、 b_4 的过程。刻划参数 $b_2 = b_3 = b_4 = 0$ 时, 就是等栅距光栅的情况, 此时, 由于对应的 F_{20} 、 F_{30} 、 F_{40} 不等于零, 将产生严重的像差。为了在光栅像面上得到无像差的光谱像, 在设计光栅时, 需要选定光栅的光学布局 (α , β , r_1 , r_2) 和光栅的刻划参数 (b_2 , b_3 , b_4)。除 F_{00} 、 F_{10} 外, 当其它的 F_{ij} 均为零时, 可得到完全无像差的光谱像。但是, 通常情况下, 不可能做到在仪器所有工作波段, 使所有的 F_{ij} 等于零。 F_{ij} 不等于零就会产生对应的像差。现已知 F_{20} 对应离焦量, F_{02} 和 F_{04} 对应象散, F_{30} 对应彗差, F_{12} 和 F_{22} 对应象散彗差, F_{40} 对应球差。在色散方向上的谱像展宽 ΔH 和垂直于色散方向上的谱像加长 ΔV 分别定义为

$$\Delta H = r_2 (\partial F / \partial y) \sec \beta, \quad \Delta V = r_2 (\partial F / \partial z) \quad (21)$$

用 $y^i z^j F_{ij}$ 替换上面两式中的 F , 即可得到 F_{ij} 对应的不同类型的像差。由于 F_{20} 对应于离焦量, 若 F_{20} 不等于零, 则谱像不能准确聚焦。因此, 在光谱仪的设计中, 通常均选择探测器的位置满足 $F_{20} = 0$ 。例如, 在传统凹面光栅光谱仪中, 选择探测器位于罗兰圆上, 使之满足

$F_{20} = 0$ 。在变栅距光栅的设计和制作中, 通过选择合适的刻划参数 b_2 、 b_3 、 b_4 , 不仅可以使聚焦条件得到满足, 还可以减小甚至消除其它的残余像差, 得到高质量的光谱像。

应用上述原理, 设计了一块平面变栅距光栅。设计时, 光栅的光学布局由实际应用条件决定。选定参数如下: 入射角 $\alpha = 87^\circ$, 入射距离 $r_1 = 5$ m, 出射距离 $r_2 = 1$ m, 工作波长 $\lambda = 5$ nm, 衍射级次 $m = 1$, 名义光栅常数 $d_0 = (1/1200)$ mm。使用这些参数, 并令 $F_{20} = F_{30} = F_{40} = 0$, 可得刻划控制参数 b_2 、 b_3 、 b_4 : $b_2 = -1.269535 \times 10^{-3} \text{ mm}^{-1}$, $b_3 = 1.205746 \times 10^{-6}$

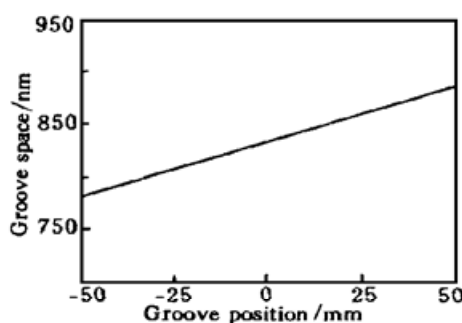


Fig. 2 Space variation of the VLS plane grating

mm^{-2} , $b_4 = -1.203235 \times 10^{-9} \text{mm}^{-3}$ 。利用(20)式可得光栅的栅距变化情况,如图2所示。

4 性能模拟计算

为了评价所设计的变栅距光栅的聚焦性能,需要对光栅进行光线追迹。目前,光栅的光线追迹有两种理论模型:一是采用光栅衍射方程的矢量形式,如著名的 SHADOW 程序^[7];二是利用光程函数和费马原理,用几何光学的方法对光栅进行光线追迹^[8]。本文采用第二种方法建立理论模型。

4.1 光线追迹的理论模型

根据费马原理,若光源 A 发出的光线经点 P 会聚于像点 B ,则光程函数 F 必须满足

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \quad (22)$$

把(1)式、(2)式代入(22)式可得

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \frac{y_1 - y}{AP} + \frac{y_2 - y}{PB} + \frac{m\lambda}{d_0}(1 + 2b_2y + 3b_3y^2 + 4b_4y^3 + \dots) = 0 \quad (23)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{z_1 - z}{AP} + \frac{z_2 - z}{PB} = 0 \quad (24)$$

令 (L_1, M_1, N_1) 和 (L_2, M_2, N_2) 分别为入射光线和衍射光线的方向余弦,则有

$$L_1 = x_1/\overline{AP}, \quad M_1 = (y_1 - y)/\overline{AP}, \quad N_1 = (z_1 - z)/\overline{AP} \quad (25)$$

$$L_2 = x_2/\overline{PB}, \quad M_2 = (y_2 - y)/\overline{PB}, \quad N_2 = (z_2 - z)/\overline{PB} \quad (26)$$

把(25)式、(26)式代入(23)式、(24)式可得

$$M_2 = -M_1 - \frac{m\lambda}{d_0}(1 + 2b_2y + 3b_3y^2 + 4b_4y^3 + \dots) \quad (27)$$

$$N_2 = -N_1 \quad (28)$$

由于 (L_1, M_1, N_1) 和 (L_2, M_2, N_2) 分别为入射光线和衍射光线的方向余弦,因此有

$$L_1^2 + M_1^2 + N_1^2 = 1, \quad L_2^2 + M_2^2 + N_2^2 = 1 \quad (29)$$

由(27)~(29)式可得

$$L_2 = \left\{ L_1^2 - \frac{2M_1m\lambda}{d_0}(1 + 2b_2y + 3b_3y^2 + 4b_4y^3 + \dots) - \left[\frac{m\lambda}{d_0}(1 + 2b_2y + 3b_3y^2 + 4b_4y^3 + \dots) \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (30)$$

至此,得到了用 (L_1, M_1, N_1) 表示的 (L_2, M_2, N_2) ,并可据此计算衍射光线与像面的交点。在光栅的实际应用中,当光栅的光学布局确定以后,像面位置即为已知。若设像面原点位于 (x_0, y_0, z_0) ,利用衍射光线的方向余弦 (L_2, M_2, N_2) 可得像点坐标为

$$x_2 = x_0, \quad y_2 = y_0 + M_2x_0/L_2, \quad z_2 = z_0 + N_2x_0/L_2 \quad (31)$$

如果利用上述模型,对光源发出的每一条光线进行追迹,可得像面的点列图(Spot diagram),即光线在像面上的分布。

4.2 模拟计算结果

设光源长 4.5 mm,宽 1.5 mm,将光源按矩阵分成 9 个子光源,每个子光源发出 9×9 条光线,并设光源为各向同性。光线追迹结果如图 3 所示,对应波长为 5 nm。从图中可以看出,图上有三组点阵线,中间那条代表中央子光源的像;中央点阵线的宽度小于两旁的两条点阵

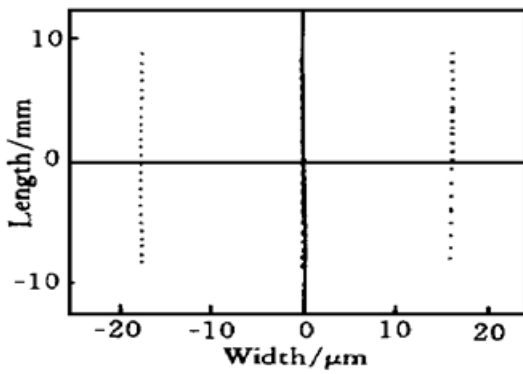


Fig. 3 Ray-traced spectral image of the VLS plane grating

线,这是因为中央子光源两旁的子光源不能很好地满足 $F_{20} = 0$ 。事实上,整个谱像的宽度主要是由光源的尺寸决定,而并非由残余像差决定。另外,需要强调一点,刻槽的有限长度并不影响此光栅的分辨率。因为,从图中可以看出,谱线在水平色散方向完全是直的,未发生弯曲。

在真空紫外及软 X 射线波段,用变栅距光栅同时作为色散元件和聚焦元件,有利于提高光谱仪的谱像质量和光通量。变栅距光栅的设计,实质上是针对特定的应用条件,确定光栅成完善像(满足 $F_{ij} = 0$) 时的栅距变化参数 b_2 、 b_3 、 b_4 的过程。利用光线追迹程序进行模拟计算的结果证明了此设计方法的可靠性。

参 考 文 献

- [1] Harada T, Kita T. Mechanically ruled aberration-corrected concave gratings. *Appl. Opt.*, 1980, **19** (23) : 3987~ 3993
- [2] Hettrick M C, Bowyer S. Variable line-space gratings: New designs for use in grazing incidence spectrometers. *Appl. Opt.*, 1983, **22**(24) : 3921~ 3924
- [3] Hettrick M C. Aberrations of varied line-space grazing incidence gratings in converging light beams. *Appl. Opt.*, 1984, **23**(18) : 3221~ 3235
- [4] Kita T, Harada T. Ruling engine using a piezoelectric device for large and high-groove density gratings. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(10) : 1399~ 1406
- [5] Ito M, Harada T, Kita T. Soft x-ray monochromator with a varied-space plane grating for synchrotron radiation: Design and evaluation. *Appl. Opt.*, 1989, **28**(1) : 146~ 153
- [6] Fujisawa M, Harasawa A, Agui A *et al.*. Varied line-spacing plane grating monochromator for undulator beamline. *Rev. Sci. Instr.*, 1996, **67**(2) : 345~ 349
- [7] Cerrina F. Ray tracing of recent VUV monochromator designs. *Proc. SPIE*, 1984, **503** : 68~ 74
- [8] Noda H, Namioka T, Seya M. Ray tracing through holographic gratings. *J. Opt. Soc. Am.*, 1974, **64** (8) : 1037~ 1042

Principle and Design of Varied Line-Space Plane Gratings

Wang Wei Yang Houmin

(Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022)

(Received 13 April 1998; revised 10 July 1998)

Abstract The focusing properties of the varied line-space plane grating was described by using the light path function. A varied line-space (VLS) plane grating for soft X-ray use was designed. The performance of the VLS grating was computed by using a ray-trace procedure, and the result was satisfactory.

Key words varied line-space grating, soft X-ray, focusing, performance simulated compute.