

文章编号: 0253-2239(2005)01-141-4

极紫外、软 X-射线变线距平面光栅单色仪的研究

吕丽军^{1,2}

(¹ 上海大学精密机械工程系, 上海 200072
² 中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

摘要: 高性能极紫外、软 X-射线单色仪的研制对高亮度同步辐射光源的应用具有十分重要的意义。对 Itou 的变线距平面光栅单色仪作了详细的分析研究, 发现它的光栅工作曲线几乎与单色仪的入、出射臂长度等参量无关, 仅取决于单色仪设计的边界条件。其曲线方程和 SX-700 单色仪的完全类似。该单色仪不仅具有很好的光栅效率和高级次谐波抑制性能, 而且有利于几条光束线共享一个电子储存环窗口的光路优化设计。

关键词: X 射线光学; 单色仪; 变线距光栅; 光栅效率

中图分类号: O434.13 文献标识码: A

Study of Ultraviolet and Soft X-Ray Varied Line-Space Plane Grating Monochromator

Lü Lijun^{1,2}

(¹ Department of Fine Mechanical Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072
² Shanghai Institute of Applied Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

Abstract: The development of ultraviolet and soft X-ray monochromators with high performances is very important to the applications of high-brightness synchrotron radiation light source. The varied line-space plane grating monochromator by Itou is studied in detail, and it is found that its grating working curve is nearly independent of the monochromator parameters, such as entrance-arm and exit-arm lengths, and only determined by its boundary condition. The curve equation is similar to that of the SX-700's. The monochromator has both very good grating-diffraction-efficiency and high-order-suppression performances. Moreover, it is very convenient to optimize the monochromator performances and solve the problem of space conflict caused by more than one beamlines that share the same storage-ring window.

Key words: X-ray optics; monochromator; varied line-space grating; grating efficiency

1 引言

变线距光栅具有自聚焦和消像差的功能, 由它构成的单色仪可以减少系统的光学元件数目, 提高系统的光学传输效率, 简化单色仪的设计和加工。随着光栅制造工艺和检测技术的不断提高, 变线距光栅在同步辐射单色仪中得到了越来越多的应用。其中, Itou^[1] 在 1989 年提出的一变线距平面光栅单色仪, 就是在一变线距平面光栅前应用一平面反射镜, 通过控制平面镜的角度来改变光线射在光栅上的包含角, 使得单色仪在工作波段内满足聚焦条件。

Petersen^[2,3] 在 SX-700 单色仪光栅效率性能的研究中, 总结出光栅在任一波长处的衍射效率主要与光束射在光栅上的掠入射角有关。并定义光栅上的光束掠入射角和工作波长的关系曲线为光栅工作曲线。许多研究表明, 像 SX-700 等变包含角的单色仪比固定包含角的光栅单色仪具有更好的光栅效率性能。下面我们在分析 Itou 单色仪的工作原理基础上, 对它的光栅工作曲线进行了详细的分析和研究。

2 单色仪的工作原理

2 单色仪的工作原理

为阐明该变线距光栅单色仪的工作原理, 我们先从变线距光栅的像差分析开始讨论。图 1 所示的是

作者简介: 吕丽军(1963~), 男, 浙江省缙云县人, 教授, 主要从事同步辐射光学和仪器技术的研究。

E-mail: lulijun63@hotmail.com

收稿日期: 2004-01-05; 收到修改稿日期: 2004-06-28

一点光源 A , 发出的光线经过一变线距光栅 VG 衍射后, 打在像面上。图中 AP 和 PB 是一条任意的入射光线和衍射光线, $P(\xi, w, l)$ 点在光栅表面上。

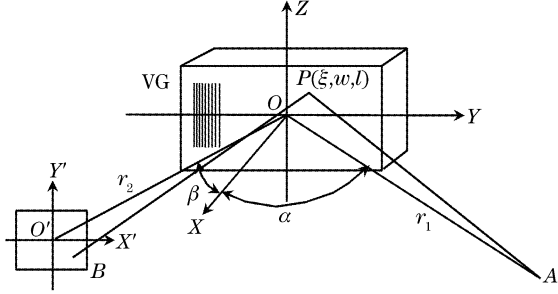


图1 变线距光栅成像的光学系统示意图

Fig.1 Optical scheme of imaging of a VLS grating

光程函数 F 由下式定义:

$$F = \langle AP \rangle + \langle PB \rangle + Nm\lambda, \quad (1)$$

其中 $\langle AP \rangle$ 和 $\langle PB \rangle$ 是表示光源 A 到 P 点和 P 点到像点 B 的距离; N, m, λ 分别表示光栅原点到 P 点之间的刻槽数目、光栅的衍射级次和工作波长。假设光栅在任意位置处的刻槽间距 d 为

$$d(w) = d_0(1 + b_2 w + b_3 w^2 + b_4 w^3 + \Lambda). \quad (2)$$

Namioka 等^[4,5] 已经导出了变线距光栅的光程函数的展开表达式:

$$F = F_{00} + wF_{10} + \frac{1}{2}w^2F_{20} + \frac{1}{2}l^2F_{02} + \frac{1}{2}w^3F_{30} + \frac{1}{2}wl^2F_{12} + \frac{1}{8}w^4F_{40} + \Lambda. \quad (3)$$

其中 w, l 是光线的孔坐标, F_{ij} 表示系统的各阶像差系数; 变线距平面光栅主要的两项: 离焦 F_{20} 和彗差 F_{30} 分别为

$$F_{20} = \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r_1} + \frac{\cos^2 \beta}{r_2} \right) - b_2 \frac{m\lambda}{d_0}, \quad (4)$$

$$F_{30} = \left(\frac{\sin \alpha \cos^2 \alpha}{r_1^2} + \frac{\sin \beta \cos^2 \beta}{r_2^2} \right) + \frac{2}{3}(b_2^2 - b_3) \frac{m\lambda}{d_0}. \quad (5)$$

其中 d_0 是光栅的标称线距; r_1, r_2 是单色仪的入、出射臂长度, α, β 是单色仪的入射角和衍射角。

在设计单色仪时, 首先要考虑消除单色仪的离焦像差, 也就是在单色仪色散平面内, 首先要满足聚焦方程 $F_{20} = 0$, 即

$$\left(\frac{\cos^2 \alpha}{r_1} + \frac{\cos^2 \beta}{r_2} \right) - b_2 \frac{m\lambda}{d_0} = 0. \quad (6)$$

另外, 光栅的入射角和衍射角还必须满足光栅方程 $d_0(\sin \alpha + \sin \beta) = m\lambda$ 。利用光栅方程用 α 代替(6)式中的 β , 得到

$$A \sin^2 \alpha + 2B \sin \alpha + C = 0, \quad (7)$$

其中

$$A = \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}, \quad B = -\frac{m\lambda}{r_2 d_0},$$

$$C = \frac{1}{r_2} \left(\frac{m\lambda}{d_0} \right)^2 + \frac{m\lambda b_2}{d_0} - A.$$

如果(7)式中有关参量 m, d_0, r_1, r_2 及 b_2 被确定, 对每个工作波长可以解得一个 α 和 β 的值。为了使单色仪在所有波长都满足聚焦条件, 光栅的包含角 $(\alpha - \beta)$ 需变化。我们采用了和 SX-700 单色仪相类似的设计, 在光栅前加一可绕着镜面外的轴转动的平面反射镜来实现包含角的变化。

b_2 是由单色仪在最短工作波长 λ_m 处和光束射在光栅上的入射角设定为 α_m 的条件确定:

$$b_2 = (\cos^2 \alpha_m / r_1 + \cos^2 \beta_m / r_2) / (N\lambda_m). \quad (8)$$

α_m 是根据单色仪的接收角、仪器参量和分辨率的要求等来决定。

例如, 要设计一块工作在 $0.62 \sim 3.0$ nm 的变线距光栅, 光源是应用第三代波荡器装置, 在色散平面内单色仪的光束垂直接收角是 $0.45 \sim 0.90$ mrad, 希望得到 5000 的分辨率和尽可能高的光子通量。可设计入射臂长 $r_1 = 3500$ mm, 出射臂长 $r_2 = 5000$ mm, 应用 800 gr/mm(线/毫米)的光栅和 +1 级衍射光谱。经反复计算校核, 在 0.62 nm 处, 光束射在光栅上的入射角 α_m 应为 89.5° 。由(8)式可得到 $b_2 = 4.7447 \times 10^{-4}$ gr/mm。另外, 根据(5)式可以利用 b_3 消除某工作波长处的彗差。在本例中, 设定此波长为 1.03 nm, 这样 $b_3 = 1.1489 \times 10^{-7}$ gr/mm²。忽略高阶像差项对成像质量的影响。这样, 可得光栅的线距为

$$d = \frac{10^6}{800} (1 + 4.7447 \times 10^{-4} w + 1.1489 \times 10^{-7} w^2). \quad (9)$$

3 光栅工作曲线分析

由上节讨论可知, 对某一工作波长, 根据(7)式可求得光束射在光栅上的入射角 α 。分析(7)式中 A, B, C 的值, 由于加工技术的限制光栅刻槽间距变化一般不超过其标称值 d_0 的 20%; 光栅宽度一般不超过 200 mm, 所以通常 $b_2 \leq 2 \times 10^{-3}$ gr/mm; 另外, $\lambda/d_0 \approx 0.01$; r_2 约为几米。因此, $A \approx C \gg B$, 我们可以得到以下近似

$$\sqrt{B^2 - AC} \approx \sqrt{-AC} \approx A \left(1 - \frac{b_2 \lambda}{2d_0 A} \right),$$

并得到

$$\sin \alpha = 1 - \frac{b_2 \lambda}{2Ad_0} - \frac{B}{A},$$

对于应用于极紫外、软 X-射线的光栅单色仪, 光栅的掠入射角

$$\alpha_g = \frac{\pi}{2} - \alpha \ll 1,$$

由此可得

$$\alpha_g^2 = \frac{1}{Ad_0} \left(b_2 - \frac{2}{r_2} \right) \lambda. \quad (10)$$

另外, 根据确定 b_2 的条件: 在最小工作波长 λ_m 设定光束射在光栅上的入射角为 α_m (或掠入射角 α_{gm}), 可得

$$b_2 = \frac{d_0 \alpha_{gm}^2}{\lambda_m} A + \frac{2}{r_2}. \quad (11)$$

将(11)式代入(10)式,

$$\alpha_g^2 = (\alpha_{gm}^2 / \lambda_m) \lambda. \quad (12)$$

(12) 式表明, 该单色仪在上述边界条件下, 光栅的工作曲线是一条过坐标原点的抛物线, 而且与单色仪的参量无关。在上节所举的设计例子中, 当 $\lambda_m = 0.62 \text{ nm}$ 时, $\alpha_{gm} = 0.5^\circ$ 。因此, 光栅的工作曲线函数为

$$\lambda = 2.48 \alpha_g^2, \quad (13)$$

式中 α_g 的单位为度, λ 的单位为 nm。

我们把它和通过解(7)式得到的精确解作比较, 如图 2 所示。在整个工作波段范围内, 掠入射角数值的最大相对误差 $< 0.3\%$, 这么小的误差对光栅的衍射效率的影响可以忽略不计。也就是说, (13) 式完全可以作为分析该系统的光栅衍射效率情况的工作曲线。

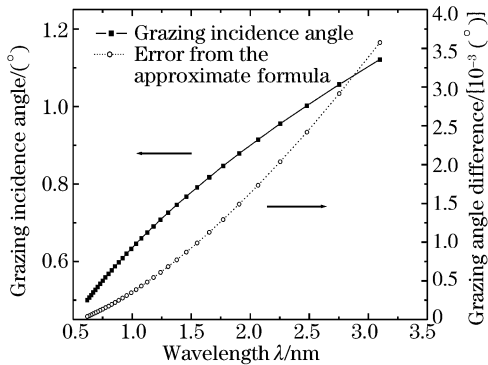


图 2 由近似方程(12)得到的工作曲线以及它与通过解精确方程(7)得到的工作曲线之间的偏差值

Fig. 2 Working curve calculated from the approximate analytical Eq. (12) and its deviations to that from the exact Eq. (7)

4 与 SX-700 单色仪光栅工作曲线的比较

下面, 我们对 SX-700 单色仪的光栅工作曲线

作类似分析, 并加以比较。在 SX-700 单色仪设计中, 为了在所有波长都满足聚焦条件, 设定其边界条件为^[6]

$$\frac{r_2}{r_1} = - \left(\frac{\cos \beta}{\cos \alpha} \right)^2 = -c_{ff}^2, \quad (14)$$

其中 c_{ff} 是常数, 在标准 SX-700 单色仪设计中 c_{ff} 值为 2.25。将(14)式和光栅方程相结合, 可以得到

$$A \sin^2 \alpha + 2B \sin \alpha + C = 0, \quad (15)$$

其中

$$A = 1 - c_{ff}^2 = \frac{r_1 + r_2}{r_1},$$

$$B = - \left(\frac{m\lambda}{d_0} \right), \quad C = \left(\frac{m\lambda}{d} \right)^2 - r_2 A.$$

很显然, 只要使(7)式中的变线距光栅的刻槽参量 $b_2 = 0$, 就变成(15)式。

同样, 这里有 $A \approx C \gg B$,

$$\sqrt{B^2 - AC} \approx \sqrt{-AC} \approx A \left(1 - \frac{\lambda^2}{2Ad_0^2} \right),$$

$$\sin \alpha = 1 - \frac{\lambda^2}{2Ad_0^2} + \frac{\lambda}{d_0 A}.$$

对于波长 λ , 光栅的掠入射角 α_g 由下式确定

$$\alpha_g^2 = \frac{1}{Ad_0^2} (\lambda^2 - 2d_0 \lambda) \approx \frac{-2}{Ad_0} \lambda = \frac{2}{(c_{ff}^2 - 1)d_0} \lambda. \quad (16)$$

从(16)式可以看出, 它也是通过坐标原点的一条抛物线(其中 α_g 的单位为弧度)。只要适当选择 SX-700 单色仪的 c_{ff} 值或上述变线距平面光栅单色仪在最小工作波长处光束打在光栅上的入射角, 这两个单色仪的光栅工作曲线可以完全相同。以上面实例中的变线距光栅的工作曲线(13)式为例, 为了使 SX-700 具有相同的光栅工作曲线, 只要它的 c_{ff} 值满足 $\frac{(c_{ff}^2 - 1)d_0}{2} \left(\frac{\pi}{180} \right)^2 = 2.48$ 。若 SX-700 的光栅刻线密度也为 $N = 800 \text{ gr/mm}$, 那么, $c_{ff} = 3.745$ 。又例如, 在标准 SX-700 设计中, $c_{ff} = 2.25$, $N = 1200 \text{ gr/mm}$, 根据(16)式, 我们就能得到 $\lambda = 0.516 \alpha_g^2$ 。在变线距光栅单色仪设计时, 要使其光栅的工作曲线和此 SX-700 的光栅工作曲线一样, 只要设定在波长 $\lambda = 0.62 \text{ nm}$ 时, 光栅的掠入射角为

$$\alpha_{gm} \Big|_{\lambda=0.62 \text{ nm}} = \sqrt{\frac{0.62}{0.516}} = 1.097^\circ.$$

5 结 论

1) 经过上面的分析表明, 在 Itou 的变线距平面光栅单色仪中, 光栅的变线距系数 b_2 由在最小工作

波长处光束射在光栅上的入射角决定,光栅的工作曲线与仪器的参量(如入射和出射臂长度)无关。入、出射臂的长度与光学元件的尺寸、热功率密度等因素相关。这样,在优化单色仪入、出射臂的长度时,就无需考虑它们对光栅效率性能的影响。它们对系统成像像差的影响也很小。

另外,由于该单色仪的衍射效率性能与入射和出射臂长度无关,因此,占用较大空间体积的单色仪主体装置(光栅室)可以方便地安排在光路中空间较大的位置,避免与相邻光束线的空间冲突。

2) 同步辐射光源的垂直发散角和光学元件对极紫外、X射线的反射临界角都是随着波长而增大。因此,理想的单色仪的光栅工作曲线分布也应是掠入射角随着波长而逐渐增大。该单色仪和 SX-700 的光栅工作曲线都是一条过坐标原点的抛物线,符合上述要求,因此具有很好的衍射效率性能。通过适当选择 SX-700 单色仪的 c_{ff} 值或上述变线距平面光栅单色仪在最小工作波长处光束射在光栅上的入射角,这两个单色仪的光栅工作曲线可以完全一样。

3) 在 SX-700 改进版设计^[7]中,通过设计不同的 c_{ff} 值,单色仪可以灵活地运行不同模式以追求某

种性能:高分辨或高通亮或高级次抑制。根据本文的讨论,变线距光栅单色仪只要应用不同参量的变线距光栅,多模式操作也一样可以达到。但它的优点是比 SX-700 单色仪少了一块前置准直镜和一块后置聚焦镜。

参 考 文 献

- 1 Itou M, Harada T, Kita T. Soft x-ray monochromator with a varied-space plane grating for synchrotron radiation: design and evaluation[J]. *Appl. Opt.*, 1989, **28**(1): 146~153
- 2 Padmore H A, Warwick T. Soft X-ray monochromators for third-generation undulator sources [J]. *J. Synchrotron Radiation*, 1994, **1**: 27~36
- 3 Petersen H. Plane grating monochromators: The working curve concept as implemented in the SX-700[C]. *Proc. SPIE*, 1986, **733**: 262~264
- 4 Noda H, Namioka T. Geometric theory of the grating[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1974, **64**(8): 1031~1048
- 5 Palmer C, Mckinney W R. Imaging theory of plane-symmetric varied line-space grating systems[J]. *Opt. Engng.*, 1994, **3**(3): 820~829
- 6 Petersen H. The plane grating and elliptical mirror: a new optical configuration for monochromators[J]. *Opt. Commun.*, 1982, **40**: 402~406
- 7 Follath R, Senf F. New plane-grating monochromator for third generation SR light source[J]. *Nucl. Instrum. Meth.*, 1997, **A390**: 384~394