

极紫外波段平面变栅距全息光栅的优化设计

姜岩秀^{1,2} 巴音贺希格¹ 杨 硕^{1,2} 赵旭龙^{1,2} 李文昊¹ 吴 娜¹

¹中科院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 为制作应用于极紫外波段(50~150 nm)的变栅距全息光栅,提出了一种新的应用于球面波曝光系统的优化算法,即改进的局部优化算法。根据仪器使用要求构建了期望刻线密度函数,并以此建立优化目标函数,其特点是使四个目标函数转化为多变量、带约束的一个目标函数,变为非线性优化问题。使用改进的局部算法时,由于对目标函数进行了加权,赋予了初值多样性,限定了记录参数取值,给出了刻线密度系数的约束条件,从而改变了各项系数对目标函数值的贡献,有效地降低了刻线密度函数系数的误差,提高了刻线函数符合程度及光栅分辨率。与常规局部优化算法相比较,使用改进的局部优化算法可使刻线密度函数与期望刻线密度函数绝对误差在0~0.02 line/mm范围内,提高一个数量级,分辨能力可由4000提高至17000以上。结果表明,只要优化方法选择得当,使用简单的球面波曝光系统可以制作高分辨率的变栅距全息光栅。

关键词 光栅;变栅距全息光栅;刻线密度;改进的局部结合优化算法;分辨率

中图分类号 O436.1

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0105002

Design of a Varied-Line-Space Plane Grating in EUV Spectrum

Jiang Yanxiu^{1,2} Bayanheshig¹ Yang Shuo^{1,2} Zhao Xulong^{1,2} Li Wenhao¹ Wu Na¹

¹Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences,
Changchun, Jilin 130033, China

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract To make varied-line-space holographic grating which is applied in the extreme ultraviolet band (50~150 nm), a new optimization algorithm applied to spherical wavefront system is proposed, named the improved local optimization algorithm. According to the request of instruments, expected varied-line-space holographic grating density function is built. Based on this density function, the merit function is given, of which characteristic is transforming four merit functions to one merit function which has multivariate and nonlinear constraints. Using the improved local algorithm, the error of groove density coefficient is reduced and the resolution of gratings is improved due to the weighted, the diversity of the initial value, the limitation of the recording parameters values range and the constraint of groove density coefficients. Compared with the conventional local optimization algorithm, using the improved local optimization algorithm makes absolute error between design and expected groove density in 0~0.02 line/mm range. And the order of magnitude is improved and the resolution increases from 4000 to above 17000. Results show that by adopting the suited optimization algorithm, varied-line-space plane grating with a high resolution can be made in the spherical wavefront system.

Key words gratings; varied-line-space holographic grating; groove density; improved local optimization algorithm; resolution

OCIS codes 050.2770; 220.3740

收稿日期: 2014-07-21; 收到修改稿日期: 2014-09-03

基金项目: 国家重大科学仪器设备开发专项“高端全息光栅研制”(2011YQ120023)

作者简介: 姜岩秀(1987—),女,博士研究生,主要从事变栅距全息光栅的设计与制作技术的研究。

E-mail: jiangyanxiup@163.com

导师简介: 巴音贺希格(1962—),男,研究员,博士生导师,主要从事光栅理论、光栅制作技术及光谱技术等方面的研究。

E-mail: bayin888@sina.com (通信联系人)

1 引 言

同步辐射是相对论性带电粒子在磁场的作用下沿弯曲轨道运动时沿切线方向发射的连续波长的电磁波光谱,其波长范围覆盖了从红外到硬X射线的连续光谱。与其他光源相比,同步辐射光源具有连续光谱、高准直性、高亮度、具有偏振以及脉冲时间结构,同时其光谱性能可预知和精确调节等特点,使其广泛应用于基础科学和物质科学等科学研究领域^[1-5]。自由电子激光作为第四代同步辐射光源,兼有辐射频率可调、不受电子跃迁能级的限制以及没有介质的热效应问题等诸多优点,具有极大的应用价值,目前全世界至少有50台自由电子激光器在运行当中^[6-7]。中国科学院大连化学物理研究所和中国科学院上海应用物理研究所合作的极紫外相干光源将是世界上第一台工作在50~150 nm极紫外波段且波长可调的自由电子激光器^[8]。由于要对传输到实验站的光源的光谱进行诊断,所以需要一个高分辨率的在线光谱仪,考虑到保持较高的能量传输特性和后续光束线传播,选择平面变栅距光栅作为此光谱仪的核心元件较为合理^[9-10]。

变栅距(VLS)光栅主要具有以下几个主要特点^[11-14]:自聚焦,像差校正能力和平焦场,可以减少光学系统中的光学元件,减少杂散光,提高衍射效率及分辨率。平面变栅距光栅的上述优势只有根据光谱仪器的使用要求,严格设计光栅刻线密度函数才能得以实现。众所周知,根据刻槽的变化进行分类,变栅距光栅可分为3种类型的光栅^[11],直平行刻槽的非等栅距光栅,弯曲刻槽的非等栅距光栅和扇形刻槽的非等栅距光栅,这几种光栅都同时具有色散和聚焦成像功能,用于自由电子激光器光谱在线诊断的光栅要求在进行光谱诊断时不能影响实验站的正常用光,因此采用一块平面变间距光栅进行分光,构成了一个近似平场的光谱诊断系统,可以达到很高的光谱分辨率。

变栅距光栅的制作方法分为两种,机械刻划与全息曝光^[15-16]。与刻划光栅相比,全息光栅制作简单,便于改变刻线形状,可制作的基底类型更加丰富,且具有无鬼线,杂散光低等优点。现今变栅距全息光栅的制作主要有两种方法,一种方法是使用球面波干涉曝光,使得基底表面不同的点以不同的干涉角度曝光,形成变栅距光栅,通过合理的选择记录参数可以消除特定阶次像差^[17]。另一种方法是使用非球面波干涉曝光,进一步增加了记录光路的自由度,理论计算可设计出与期望刻线密度函数完全符合的变栅距全息光栅,消除高阶像差^[18]。但在实际制作过程中,由于其制作光路较为复杂且引入了辅助镜,为满足设计要求,对辅助镜的加工以及记录参数的调试都有较高的要求,工艺上不易实现,往往导致制作的变栅距全息光栅的刻线密度函数与期望刻线密度函数存在较大的误差。由于球面波曝光光路仅有4个记录参数,工艺上实现调试精度相对容易,进而得到符合设计要求的变栅距全息光栅,因此深入研究球面波曝光下的平面变栅距全息光栅设计及记录参数的优化算法具有实际应用价值和迫切需求。本文拟以变栅距全息光栅像差理论为基础,采用一种全局优化与局部优化相结合的新算法,研究应用于平面变栅距全息光栅设计的优化原则,设计出较高光谱分辨率的全息变栅距光栅,旨在探索用简单曝光系统(即第一代全息曝光系统),制作高精度平面变栅距全息光栅的途径。

2 球面波曝光系统下变栅距全息光栅的设计

2.1 变栅距全息光栅刻线密度函数表达式

图1为变栅距全息光栅的球面波记录光路图。

从光程函数出发,根据球面波几何理论计算基底上任意一点的光程差,将费马原理应用到光程函数中,并对其进行级数展开,最终得到变栅距光栅的刻线密度函数^[19]。主要研究在光栅子午面内刻线密度的符合程度,暂且忽略刻线弯曲,令 $z=0$,将变栅距全息光栅刻线密度函数简化为

$$n = n_{10} + n_{20}y + \frac{3}{2}n_{30}y^2 + \frac{1}{2}n_{40}y^3 + \dots, \quad (1)$$

式中系数 n_{10} 、 n_{20} 、 n_{30} 和 n_{40} 是关于球面波记录参数 $(\gamma, r_c, \delta, r_d)$ 的函数, n_{10} 为光栅中心处的刻线密度, n_{20} 、 n_{30} 和 n_{40} 为变间距光栅的刻线密度参数, n_{20} 对应离焦, n_{30} 和 n_{40} 分别对应彗差和球差,具体数学形式为

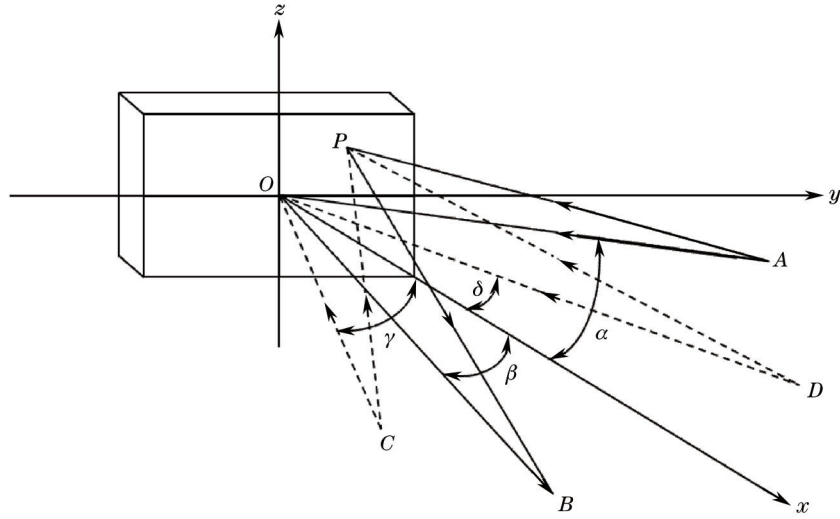


图 1 球面波曝光系统

Fig. 1 Spherical wavefront recording system

$$\begin{cases} n_{10} = \frac{1}{\lambda_0}(\sin \delta - \sin \gamma) \\ n_{20} = \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{\cos^2 \gamma}{r_c} - \frac{\cos^2 \delta}{r_d} \right) \\ n_{30} = \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{\cos^2 \gamma \sin \gamma}{r_c^2} - \frac{\cos^2 \delta \sin \delta}{r_d^2} \right) \\ n_{40} = \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{4 \cos^2 \gamma \sin^2 \gamma}{r_c^3} - \frac{4 \cos^2 \delta \sin^2 \delta}{r_d^3} + \frac{\cos^4 \gamma}{r_c^3} + \frac{\cos^4 \delta}{r_d^3} \right) \end{cases} \quad (2)$$

2.2 变栅距全息光栅像差原理

根据 Itou 的数学模型^[20], 变栅距全息光栅的光程函数 F 可以表示为关于 (y, z) 的函数:

$$F = r_c + r_d + yF_{10} + y^2F_{20} + z^2F_{02} + y^3F_{30} + yz^2F_{12} + y^4F_{40}, \quad (3)$$

式中 F_{ij} 可表示为

$$\begin{cases} F_{ij} = C_{ij} + n_{10} m \lambda M_{ij}, \\ \begin{cases} M_{10} = 1, C_{10} = -\sin \alpha - \sin \beta \\ M_{20} = \frac{n_{20}}{2n_{10}}, C_{20} = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r_1} + \frac{\cos^2 \beta}{r_2} \right) \\ M_{30} = \frac{n_{30}}{2n_{10}}, C_{30} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin \alpha \cos^2 \alpha}{r_1^2} + \frac{\sin \beta \cos^2 \beta}{r_2^2} \right) \\ M_{40} = \frac{n_{40}}{8n_{10}}, C_{40} = \frac{1}{8} \left(\frac{4 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha - \cos^4 \alpha}{r_1^3} + \frac{4 \sin^2 \beta \cos^2 \beta - \cos^4 \beta}{r_2^3} \right) \end{cases} \end{cases} \quad (4)$$

$$\quad (5)$$

M_{ij} 只与使用参数 A, B 的坐标有关, C_{ij} 只与记录点 C, D 的坐标有关。 F_{ij} 即为平面变间距全息光栅的像差, 其中 F_{20} 为离焦, F_{30} 为子午彗差, F_{40} 为球差, 其他代表高阶像差。由(5)式可以看出光程函数 F 不仅与使用参数 A, B 两点的位置有关, 而且还与记录点光源 C, D 的位置有关。

2.3 变栅距全息光栅的刻线密度函数构建

通过以上分析可知, 像差 F_{ij} 由使用参数和记录参数共同决定。对于特定使用波长, 且使用参数确定的情况下通过合理地选择记录参数可以使得特定的 $F_{ij}=0$, 即可使得变栅距全息光栅在 xy 平面聚焦成像。但是, 在实际中不可能实现在光谱仪器的全工作波段完全消除像差, 需要针对性的消除各类像差。

表 1 平面变栅距全息光栅的设计参数

Table 1 Design parameters of the plane VLS grating

| Parameters | Value |
|---------------------------------------|--------|
| Centre groove density l /(line/mm) | 600 |
| Wavelength range /nm | 50~150 |
| Incident distance r /mm | 19000 |
| Incident angle α /($^\circ$) | 87.5 |
| Position of plane detector f /mm | 1500 |
| Resolution | 12000 |
| Grating area /mm ² | 30×10 |

表 1 为应用于在线诊断极紫外波段光谱仪的平面变栅距光栅的使用参数^[8]。根据光栅使用参数、光栅方程及(4)、(5)式,令变栅距光栅聚焦方程 $F_{20}=0$, 彗差校对方程 $F_{30}=0$ 以及球差校对方程 $F_{40}=0$, 即

$$\begin{cases} \sin \alpha + \sin \beta = n_{10} m \lambda \\ F_{20} = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r_1} + \frac{\cos^2 \beta}{r_2} + n_{20} m \lambda \right) = 0 \\ F_{30} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin \alpha \cos^2 \alpha}{r_1^2} - \frac{\sin \beta \cos^2 \beta}{r_2^2} + n_{30} m \lambda \right) = 0 \\ F_{40} = \frac{1}{8} \left(\frac{4 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha - \cos^4 \alpha}{r_1^3} - \frac{4 \sin^2 \beta \cos^2 \beta - \cos^4 \beta}{r_2^3} + n_{40} m \lambda \right) = 0 \end{cases}, \quad (6)$$

对此方程组求解即可得到变栅距光栅的刻线密度函数系数:

$$\begin{cases} n_{10} = 600 \\ n_{20} = -0.7869 \\ n_{30} = 5.2921 \times 10^{-4} \\ n_{40} = -1.1938 \times 10^{-6} \end{cases}, \quad (7)$$

故刻线密度函数为

$$n(x) = 600 - 0.7869y + 7.3982 \times 10^{-4}y^2 - 5.969 \times 10^{-7}y^3. \quad (8)$$

3 变栅距全息光栅的记录参数优化

3.1 目标函数的确定

根据由光谱仪器使用要求求得的变栅距全息光栅刻线密度函数(8)式,对变栅距全息光栅记录参数进行优化设计,其方法是选择合适的记录参数使制作出来的变栅距光栅的刻线密度函数在光栅有效区域内逼近(8)式。但是,由于变栅距光栅刻线密度函数是一个以记录参数为变量的多变量函数,需要建立以(8)式作为期望函数的变栅距光栅刻线密度目标函数,设

$$n_e = n_0 + n_1y + n_2y^2 + n_3y^3, \quad (9)$$

对于球面波曝光光路,根据(1)、(2)和(9)式建立非线性方程组求解系数 n_0 、 n_1 、 n_2 和 n_3 , 它们是关于记录参数 $(\gamma, r_c, \delta, r_d)$ 的函数, λ_0 为记录波长, 即

$$\begin{cases} \frac{1}{\lambda_0} (\sin \delta - \sin \gamma) = n_0 \\ \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{\cos^2 \gamma}{r_c} - \frac{\cos^2 \delta}{r_d} \right) = n_1 \\ \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{\cos^2 \gamma \sin \gamma}{r_c^2} - \frac{\cos^2 \delta \sin \delta}{r_d^2} \right) = n_2 \\ \frac{1}{\lambda_0} \left(\frac{4 \cos^2 \gamma \sin^2 \gamma}{r_c^3} - \frac{4 \cos^2 \delta \sin^2 \delta}{r_d^3} + \frac{\cos^4 \gamma}{r_c^3} + \frac{\cos^4 \delta}{r_d^3} \right) = n_3 \end{cases}. \quad (10)$$

但在求解(10)式时无法建立有效的约束, n_0, n_1, n_2 和 n_3 难以同时满足期望值, 或同时满足期望值却无法得到合理的记录参数 $(\gamma, r_c, \delta, r_d)$ 。为此, 将多目标函数优化简化为单一目标函数优化, 即将光栅表面各点期望刻线密度与设计刻线密度误差的平方的积分函数作为目标函数进行优化, 求其最小值, 由此获得理想的记录参数, 即目标函数为

$$o_{bj} = r_1^2 + \frac{1}{3}y_0^2(2r_1r_3 + r_2^2) + \frac{1}{5}y_0^4(r_3^2 + 2r_2r_4) + \frac{1}{7}y_0^6r_4^2, \quad (11)$$

$$\begin{cases} r_1 = n_{10} - n_0 \\ r_2 = n_{20} - n_1 \\ r_3 = \frac{3}{2}n_{30} - n_2 \\ r_4 = \frac{1}{2}n_{40} - n_3 \end{cases} \quad (12)$$

式中 $2y_0$ 为光栅有效宽度, r_1, r_2, r_3 和 r_4 为设计刻线密度系数与期望刻线密度系数误差。

与传统的多变量非线性方程组求解相比, 建立的单目标函数(11)式在优化时, 可对求解的记录参数取值范围做合理的限定, 这样在计算时可避免优化结果的不合理性(即在实际光路中无法实现), 缩短计算时间, 提高运算效率。

3.2 优化方法

将多目标函数化为单目标函数后, 目标函数优化转化为带约束的非线性优化问题。解决此类优化问题主要用非数值分析方法, 通过随机采样来寻找目标函数的最优解。主要分为两类^[21]: 一种是基于局部搜索的优化方法; 另一种是全局搜索演化算法。局部搜索方法易于实现, 但算法依赖于搜索初值, 若初值选择不当, 在解空间中达到某一局部极小值后就会停止运算, 无法获得最佳记录参数。全局优化算法由于全局搜索能力强, 可较好的解决局部极小值问题, 较快达到最优解的 90%, 但局部搜索能力的不足导致剩余优化时间长, 甚至出现早熟收敛现象, 无法得到最优解^[22]。在变栅距全息光栅记录光路优化方面, 楼俊等^[21, 23]提出基于遗传算法的全局优化改进算法, 较好地解决了记录光路的优化问题, 但是, 它们更适用于非球面波曝光系统, 对仅有 4 个自由度的球面波曝光系统设计结果误差较大。鉴于此, 根据球面波曝光系统特点, 结合局部算法搜索效率高以及全局算法搜索范围广的优势提出了一种新的优化算法, 拟将应用于极紫外波段在线监测光谱仪用变栅距全息光栅设计。

具体算法流程如下:

- 1) 根据 n_{10}, n_{20}, n_{30} 和 n_{40} 对目标函数的贡献, 对目标函数中的变量引入相关加权因子, 改变其对目标函数的影响;
- 2) 由(8)式可知, n_{10}, n_{20} 量级分别为 $10^2, 10^{-1}$, n_{30}, n_{40} 量级分别为 $10^{-4}, 10^{-7}$, 故在对刻线密度目标函数进行优化时, 以 n_{10}, n_{20} 作为非线性约束条件, 避免出现由优化结果得到的光栅刻线密度与期望值误差较大。
- 3) 根据变栅距全息光栅的中心刻线密度及光栅方程计算角度记录参数 (γ, δ) 的取值范围, 并将其最小值 $(\gamma_{\min}, \delta_{\min})$ 作为角度优化初值, 即

$$\begin{cases} \sin \gamma_{\min} + \sin \delta_{\max} = n_0 \lambda_0 \\ \sin \gamma_{\max} + \sin \delta_{\min} = n_0 \lambda_0 \end{cases} \Rightarrow (\gamma_{\min}, \gamma_{\max}, \delta_{\min}, \delta_{\max}). \quad (13)$$

根据光学平台尺寸限定光路位移范围 $(r_{c\min}, r_{c\max}, r_{d\min}, r_{d\max})$, 以上述两组取值范围初值进行分组, 分组方法采取遗传算法初始种群的分类方法, 在 4 个记录参数 $(\gamma, r_c, \delta, r_d)$ 的取值范围内选取若干个数, 每一个分向量称作一个个体, 所有个体构成种群, 每个个体通过随机方法产生, 保证了个体的多样性以及全面性, 由此建立循环结构, 每组个体设为每次优化的初值进行优化计算。

- 4) 使用局部优化算法对目标函数进行优化, 以外点罚函数法作为工具进行迭代求解。根据步骤 2), 将 $n_{10} - n_0 = 0, n_{20} - n_1 = 0$ 设为非线性约束条件, 以此建立中间函数 $\psi(x) = \sum_{u=1}^2 [h_u(x)]^2$, 其中 $h(x)$ 为非线性约束函数。将中间函数引入到由步骤 1) 所得目标函数, 将优化问题转化为无约束优化问题, 转化后的目标函数为

$f'(x) = f(x) + r \sum_{u=1}^2 [h_u(x)]^2$, 其中 r 为罚因子为正的递增序列, $r^{(v)} = cr^{(v-1)}$, $c > 1$ 。在计算过程中随着设计变量移向约束边界, 使中间函数不断变小, 罚因子不断变大, 直至计算终止。

5) 迭代终止的条件。分别需要满足自变量的精度要求和相邻两点目标函数值绝对误差精度要求: $|x^*[r^{(v)}] - x^*[r^{(v-1)}]| \leq \varepsilon_1, |f\{x^*[r^{(v)}]\} - f\{x^*[r^{(v-1)}]\}|$, 满足收敛条件时终止计算。

6) 将得到的记录参数输出, 并对刻线密度函数的系数进行判断, $\Delta r_i = r_{i0} - r_{i-1}, i=1,2,3,4$, 若是 $\Delta r_i \leq 10^{-3}$, 则输出记录参数, 否则舍弃优化结果, 返回步骤 2), 继续运算直至每个个体都经过优化得到最优解。

3.3 优化设计结果及分析

根据(7)、(8)式及表 1, 记录波长取 441.6 nm, 分别采用上节所述的全局与局部算法相结合的优化算法(简称为改进的局部优化算法)和常规局部优化算法(简称局部优化算法), 对球面波曝光系统条件下的平面变栅距全息光栅进行了优化设计。

3.3.1 变栅距全息光栅记录参数

表 2 为采用改进的局部优化算法和局部优化算法对记录参数 (γ, r_c, δ, r_D) 进行优化的结果, 表中后缀 1 表示改进的局部优化算法计算结果, 后缀 2 表示局部优化算法计算结果。由表 2 可以看出, 改进后记录参数 r_c 明显大于改进前, 且两臂长度接近, 有利于曝光系统调试。

表 2 记录参数优化结果比较

Table 2 Recording parameters of the plane VLS grating

| Parameters | r_c /mm | γ /rad | r_D /mm | δ /rad |
|------------|-----------|---------------|-----------|---------------|
| Value 1 | 1463.88 | -1.544 | 1322.60 | -0.825 |
| Value 2 | 259.53 | -1.427 | 1099.91 | -0.811 |

3.3.2 刻线密度函数系数

表 3、4 分别为采用改进的局部优化算法和局部优化算法对刻线密度函数系数设计值及其与期望值之间的绝对误差, 表 3 第一行为期望值(后缀 0 表示), 第二行为改进的局部优化结果, 第三行为局部优化结果。表 4 第一行为改进的局部优化结果与期望值之间的绝对误差(后缀 1 表示), 第二行为局部优化结果与期望值之间的绝对误差(后缀 2 表示)。由表 3、4 可以看出, 改进后刻线密度函数 n_1, n_2 和 n_3 的明显大于改进前, 降低了设计值与期望值的刻线密度函数误差。

表 3 光栅刻线密度系数优化结果比较

Table 3 Groove density coefficient of the plane VLS grating

| Parameters | n_0 | n_1 | n_2 | n_3 |
|------------|----------|---------|--------------------------|--------------------------|
| Value 0 | 600 | -0.7869 | 7.3982×10^{-4} | -5.969×10^{-7} |
| Value 1 | 600.0000 | -0.7869 | 6.5573×10^{-4} | -3.8229×10^{-7} |
| Value 2 | 600.0000 | -0.7990 | -5.4121×10^{-5} | 6.2150×10^{-7} |

表 4 刻线密度函数系数设计值与期望值绝对误差比较

Table 4 Groove density absolute error of the plane VLS grating

| Parameters | Δn_0 | Δn_1 | Δn_2 | Δn_3 |
|------------|-------------------------|------------------------|-------------------------|-------------------------|
| Value-1 | 6.67×10^{-11} | 9.03×10^{-14} | 8.40×10^{-5} | 2.14×10^{-7} |
| Value-2 | 9.9182×10^{-8} | 0.0121 | 7.9394×10^{-4} | 5.0998×10^{-6} |

3.3.3 刻线密度函数分布曲线

根据表 3 得到改进的局部优化算法变栅距全息光栅刻线密度函数 N_1 和局部优化算法下的和变栅距全息光栅刻线密度函数 N_2 , 即

$$\begin{cases} N_1 = 600 - 0.7869y + 6.5573 \times 10^{-4}y^2 - 3.8229 \times 10^{-7}y^3 \\ N_2 = 600 - 0.7990y - 5.4121 \times 10^{-4}y^2 - 6.2159 \times 10^{-7}y^3 \end{cases} \quad (14)$$

图 2、3 分别为采用改进的局部优化算法和局部优化算法对刻线密度函数分布曲线及其与期望值之间的

绝对误差与相对误差。由图可知,相比于传统的局部优化算法,使用改进的局部优化方法得到的变栅距全息光栅的刻线函数与期望值符合程度明显大于改进前,变栅距全息光栅的刻线密度的绝对误差最大值由 0.35 line/mm 降至 0.02 line/mm,变栅距全息光栅的刻线密度的相对误差最大值 7×10^{-4} 降至 4×10^{-5} ,均提高了一个数量级。

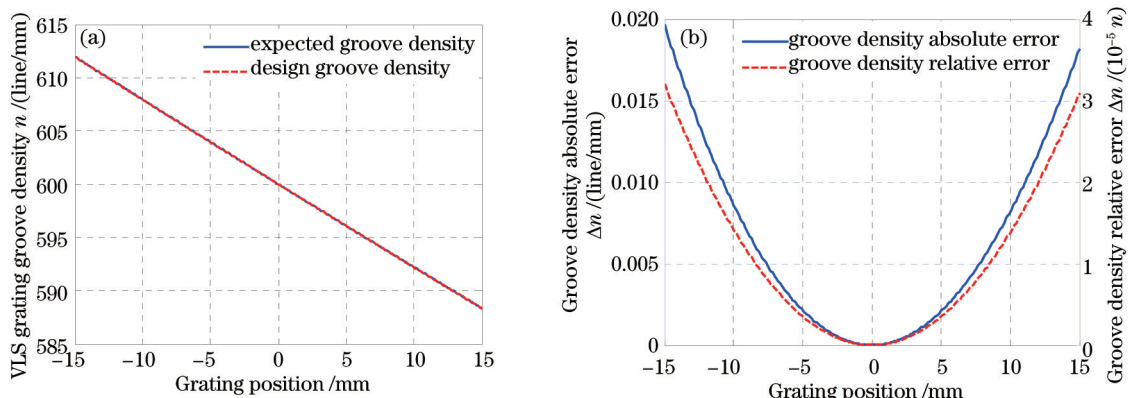


图2 改进的局部算法下刻线密度分布曲线。(a) 设计与期望刻线密度函数曲线; (b) 设计与期望刻线密度函数的绝对误差与相对误差曲线

Fig.2 Groove density curve of the plane VLS grating using improved local optimization algorithm. (a) Designed and expected groove density curve of the plane VLS grating; (b) absolute and relative error curve of the plane VLS grating between designed and expected groove density

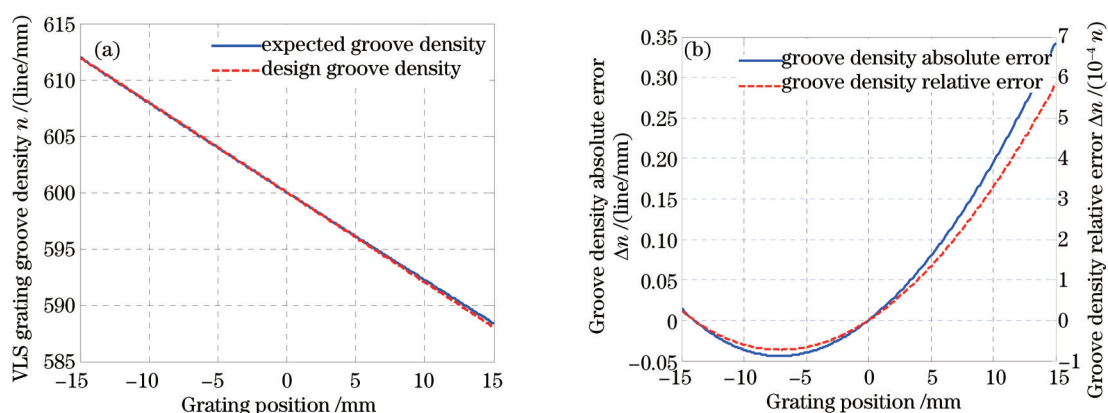


图3 局部算法下刻线密度分布曲线。(a) 设计与期望刻线密度函数曲线; (b) 设计与期望刻线密度函数的绝对误差与相对误差曲线

3.3.4 分辨率计算和分析

由表4、图2及图3可知,虽然设计与期望刻线密度函数分布曲线基本重合,但是刻线密度函数系数 n_2 和 n_3 设计值与期望值之间的误差较大,其绝对误差,相对误差如表5所示。表5第一行为改进的局部优化系数 n_2 和 n_3 与期望值之间的绝对误差与相对误差值(后缀1表示),第二行为局部优化系数 n_2 和 n_3 与期望值之间的绝对误差与相对误差值(后缀2表示)。由表5可知,相比于传统的局部优化算法,使用改进的局部优化方法得到的 n_2 和 n_3 与期望值符合程度明显大于改进前, n_2 的绝对误差由 7.9394×10^{-4} line/mm 降至 8.40×10^{-5} line/mm,相对误差由 107.3% 降至 11.3%。 n_3 的绝对误差由 5.0998×10^{-6} line/mm 降至 2.14×10^{-7} line/mm,相对误差由 854.4% 降至 35.9%。

表5 刻线密度函数系数绝对误差与相对误差

Table 5 Absolute and relative error between the plane VLS grating groove density coefficient

| Parameters | Δn_2 | Δn_3 | $\Delta n_2/n_2$ | $\Delta n_3/n_3$ |
|------------|-------------------------|-------------------------|------------------|------------------|
| Value 1 | 8.40×10^{-5} | 2.14×10^{-7} | 11.3% | 35.9% |
| Value 2 | 7.9394×10^{-4} | 5.0998×10^{-6} | 107.3% | 854.4% |

虽然使用改进的局部优化方法极大地提高了系数 n_2 和 n_3 的符合程度,但 n_2 和 n_3 设计值与期望值仍存在一定的误差。尽管这对刻线密度函数的曲线分布影响不大,由于 n_2 、 n_3 分别对应彗差与球差,显然像差越大,分辨率也就越低,有必要进一步分析分辨率是否能够达到仪器要求。

根据瑞利准则,光栅理想分辨率^[24]表示为

$$R_p = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}. \quad (15)$$

影响在线诊断极紫外光谱仪分辨率的因素较多,包括光栅本身的衍射极限,光源点的大小、衍射光输出窗口的大小、光栅基底面形误差、光栅的像差等。在理想条件下,在此仅考虑影响变栅距光栅自身对光谱分辨率的因素影响^[25]:

1) 根据光栅方程,光栅衍射极限为

$$\Delta\lambda_1 = \frac{\lambda}{mN}. \quad (16)$$

2) 光栅像差对光谱分辨率的影响:衍射谱线在色散方向偏离高斯像点会对光谱分辨率造成影响,像差越大,谱线就越宽,分辨率也就越低^[26],根据光栅像差理论,像差对光谱分辨的影响为

$$\Delta\lambda_2 = \frac{d}{m}(yF_{20} + \frac{3}{2}y^2F_{30} + \frac{1}{2}y^3F_{40} + \dots). \quad (17)$$

对于 $m=+1$ 时,各项像差对谱线宽度的影响为 $\Delta\lambda_{de} = 2dYF_{20}$, $\Delta\lambda_{co} = \frac{3}{2}dY^2F_{30}$, $\Delta\lambda_{sp} = dY^3F_{30}$ 。其中 N 为光栅刻线总数, m 为衍射级次, F_j 为像差系数, Y 为有效光栅区域的半长度。

总的谱线宽度为

$$\Delta\lambda = \sqrt{\Delta\lambda_1^2 + \Delta\lambda_2^2}. \quad (18)$$

图 4(a)、(b) 分别为采用改进的局部优化算法和局部优化算法对在 50~150 nm 光谱范围内的光栅衍射极限、彗差、球差以及总的谱线宽度分布曲线。由图可知,使用改进的局部优化方法得到的变栅距全息光栅分辨率主要受光栅自身衍射极限影响,其球差与彗差对光栅的影响小至可忽略不计,设计的变栅距全息光栅在全波段都能够达到 17000 以上的分辨能力。然而,使用局部优化方法得到的变栅距全息光栅分辨率受球差和彗差影响较大,极大地降低了光栅分辨率,在整个波段都达不到 12000 的仪器使用要求^[8]。

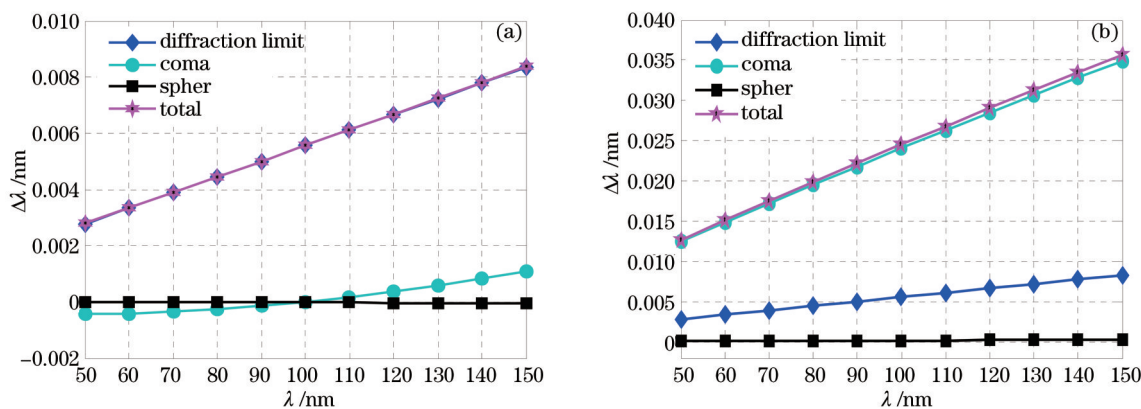


图 4 衍射极限以及像差对谱线宽度的影响。(a)改进的局部优化算法得到的光栅分辨率;(b)局部优化算法得到的光栅分辨率
Fig.4 Calculated resolution of this spectrograph. (a) Calculated resolution of the plane VLS grating using improved local optimization algorithm; (b) calculated resolution of the plane VLS grating using local optimization algorithm

4 实验验证

根据改进的局部优化算法得到的记录参数(-1.544 rad, -0.825 rad, 1463.88 mm, 1322.60 mm)搭建制作变栅距全息光栅曝光光路。实验中制作光栅的光路示意图如图 5 所示, M1~M4 为反射镜, BS 为分束镜, 以波长为 441.6 nm 的 He-Cd 激光器(laser1)作为记录光源, 波长为 632.8 nm 的 He-Ne 激光器(laser2)作为定位光源, 选择 10 倍的显微物镜(MO)扩束, 以 20 μm 的针孔(pinhole1、2)进行空间滤波。

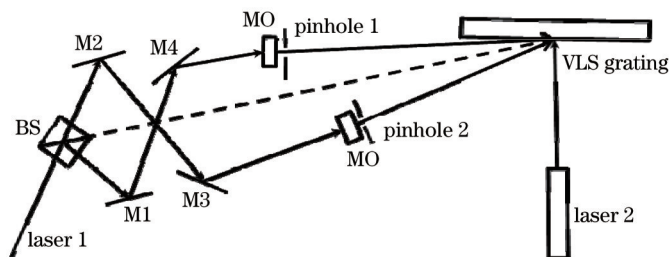


图5 平面变栅距全息光栅制作光路图

Fig.5 Schematic diagram of a spherical wavefront holographic recording system

由曝光参数可知,由于其中一路光为掠入射,经计算可知,对应于针孔1和针孔2的两路光斑的能量比 $E_1:E_2=1:34$,难以形成对比度较好的明暗条纹。为了解决这一问题,订制了一个分束比为34:1的BS,以实现通过调节分束镜角度来调节两束初始入射光的能量比,使得到达光栅基底能量比约为 $E_1:E_2=1:1$ 。光路调试完成后,采用180 mW的He-Cd激光器作为曝光光源,选用Shipley S1805光刻胶作为记录材料,胶厚约为550 nm,显影液为0.036%(质量分数)NaOH溶液。曝光时间120 s,显影时间30 s,制作出占宽比为0.64的变栅距光刻胶光栅,图6为原子力显微镜(AFM)剖面图。

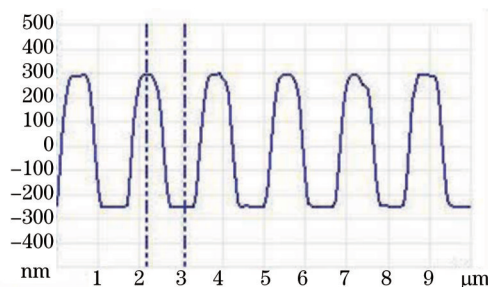


图6 平面变栅距全息光栅 AFM 剖面图

Fig.6 AFM picture of plane VLS grating

利用中国科学技术大学国家同步辐射实验室搭建的刻线密度测量装置^[27]对制作的32 mm×32 mm平面变栅距光刻胶光栅进行了测量。在光栅中心线(即子午线)上测量9个点,测量数据如表6所示。

表6 变栅距全息光栅刻线密度测量值与设计值

Table 6 Design value and measure value of VLS grating groove density

| Position /mm | Design value /(line/mm) | Measure value /(line/mm) | Error /% |
|--------------|-------------------------|--------------------------|----------|
| -12 | 609.54 | 609.29 | 0.04 |
| -9 | 607.13 | 606.29 | 0.13 |
| -6 | 604.74 | 604.58 | 0.02 |
| -3 | 602.36 | 602.21 | 0.02 |
| 0 | 600.00 | 599.80 | 0.03 |
| 3 | 597.64 | 597.45 | 0.03 |
| 6 | 595.30 | 595.08 | 0.03 |
| 9 | 592.97 | 592.76 | 0.03 |
| 12 | 590.65 | 590.34 | 0.05 |

根据(9)式以及表6测量数据,采用三次多项式拟合,求得的光栅刻线密度函数表达式为

$$n_{\text{measurement}} = 599.8272 - 0.7893y - 8.6078 \times 10^{-5}y^2 - 1.2572 \times 10^{-6}y^3. \quad (19)$$

根据(14)式 N_i 表达式和(19)式绘制刻线函数设计值与测量值分布曲线以及设计值与测量值误差分布曲线,如图7所示。

由图7(b)可知刻线密度理论计算值与测量值仍存在0~0.35 line/mm的误差,这是因为变栅距全息光栅刻线密度函数不仅与四个记录参数的设计值有关,它还与记录参数的调试和测量系统相关。在平面变栅距全

息光栅光路调试过程中,各个记录参数必然在其位置附近产生漂移,这一漂移量即为记录参数误差,而制作误差必然会影响平面变栅距全息光栅的刻线密度函数分布。在对变栅距全息光栅刻线密度函数进行测量时,对中心位置定位不精确也会产生面变栅距全息光栅的刻线密度函数误差,所以理论计算值与测量值间0~0.35 line/mm的误差是由制作与测量误差引起的,与优化的记录参数无关。由表6和图7(a)可知,制作的变栅距全息光栅刻线密度函数变化的趋势以及刻线密度函数分布曲线与设计要求一致,且光栅各点刻线密度测量结果与理论计算结果的误差最大也不超过0.13%,这充分说明了使用改进的局部优化算法,使用简单的球面波也可以制作高分辨率的变栅距全息光栅。

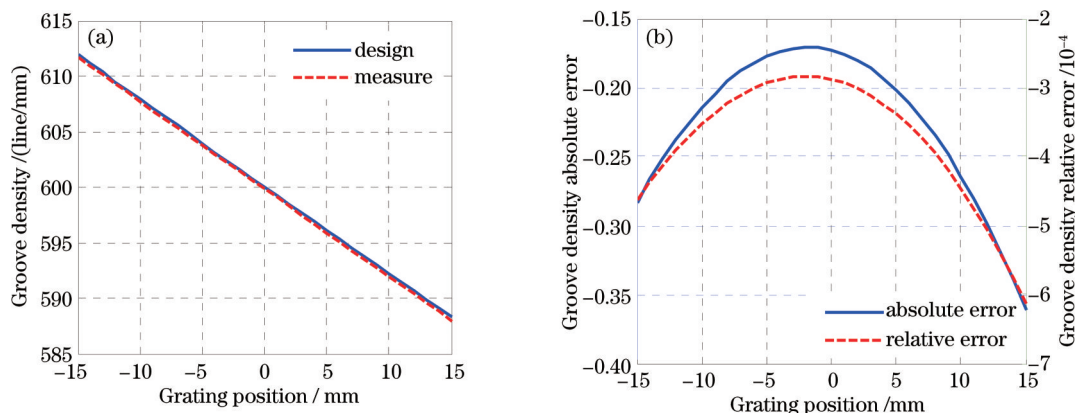


图7 刻线密度分布曲线。(a)设计与测量刻线密度函数曲线;(b)设计与测量刻线密度函数的绝对误差与相对误差曲线
 Fig.7 Groove density curve of the plane VLS grating .(a) Design and measure groove density curve of the plane VLS grating; (b) absolute and relative error curve of the plane VLS grating between design and measure groove density

5 结 论

为制作较高光谱分辨率的变栅距全息光栅,根据简单球面波曝光系统特点建立目标函数,提出了一种设计应用于极紫外段变栅距全息光栅的新局部优化算法。通过对改进的局部优化算法及常规局部优化算法的优化结果进行对比分析,可得如下结论:1)当变栅距全息光栅的刻线密度函数系数二次项 n_2 和三次项系数 n_3 数值较小时,其对刻线密度函数影响很小,刻线密度函数主要由常数项系数 n_0 和一次项系数 n_1 决定;2)变栅距全息光栅的刻线密度函数系数二次项 n_2 和三次项系数 n_3 分别对应彗差与球差,当设计值与期望值存在较大误差时,会极大地降低光栅的分辨率。针对这个共性问题,采用改进的局部优化算法,对目标函数中的刻线密度函数系数 n_0 、 n_1 、 n_2 和 n_3 进行分析,对其加权,改变各项对目标函数值的贡献,可有效降低数值较小的 n_2 和 n_3 的误差,提高刻线函数符合程度及光栅分辨率;3)采用改进的局部算法,由于赋予初值多样性,限定记录参数取值,对刻线密度系数加以约束后,可避免局部优化依赖初值的缺陷和结果的不合理性;4)只要优化方法选择得当,使用简单的球面波也可以制作高分辨率的变栅距全息光栅。此方法可移植到设计结构简单的柱面波曝光系统,并制作消像差平面变栅距直条纹全息光栅的工作中。

参 考 文 献

- 1 K Kim. Characteristics of synchrotron radiation [C]. American Institute of Physics Conference Proceedings, 1989, 184: 565-632.
- 2 P H Duke. Synchrotron Radiation [M]. Oxford: Oxford University Press, 2000.
- 3 Ma Dunli. Introduction to Synchrotron Radiation Applications [M]. Shanghai: Fudan University Press, 2001.
马礼敦. 同步辐射应用概论[M]. 上海: 复旦大学出版社, 2001.
- 4 A Hofmann. The Physics of Synchrotron Radiation [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- 5 Liu Zuping. Synchrotron Radiation Physics Introduction [M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2009.
刘祖平. 同步辐射光源物理引论[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2009.
- 6 D A G Deacon, F L R Elias, J M J Madey, *et al.*. First operation of a free-electron laser [J]. Phys Rev Lett, 1977, 38(16): 892-894.
- 7 U Bergmann, J Corlett, S Dierker, *et al.*. Science and Technology of Future Light Sources [R]. Lawrence Berkeley National Laboratory, 2009.

- 8 Li Chaoyang. Variable-Line-Spacing Grating Monochromators Design and Key Techniques [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2014.
李朝阳. 变线距光栅单色器设计及关键技术[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2014.
- 9 Francis Polack, B Lagarde, M Idir. A high resolution soft X-ray monochromator focused by the holographic effect of a VLS grating [C]. Synchrotron Radiation Instrumentation: Ninth International Conference, 2007, 879: 655-658.
- 10 Li Chaoyang, Zhu Junfa, Wang Qiuping. Design of a varied-line-spacing plane grating monochromator for surface physics [J]. Journal of Physics: Conference Series, 2013, 425(16): 162008.
- 11 Shi Lun, Hao Defu. Theory and applications of varied line-space gratings [J]. Optical and Precision Engineering, 2001, 9(3): 284-287.
时 轮, 郝德阜. 变栅距衍射光栅的原理及应用[J]. 光学 精密工程, 2001, 9(3): 284-287.
- 12 M C Hettrick, J H Underwood, *et al.*. Resolving power of 35,000 (5 mA) in the extreme ultraviolet employing a grazing incidence spectrometer [J]. Appl Opt, 1988, 27(2): 200-202.
- 13 M C Hettrick, J H Underwood. Varied-space grazing incidence gratings in high resolution scanning spectrometers [C]. American Institute of Physics Conference Proceedings, 1986, 147: 237-245.
- 14 M Koike, T Namioka. High resolution grazing incidence plane grating monochromator for undulator radiation [J]. Rev Sci Instrum, 1995, 66(2): 2144-2146.
- 15 M Koike, T Namioka. Plane gratings for high resolution grazing incidence monochromators holographic grating versus mechanically ruled varied-line-spacing grating [J]. Appl Opt, 1997, 36(25): 6308-6318.
- 16 Li Xiaotian, Yu Haili, Qi Xiangdong, *et al.*. 300 nm-travel stage of grating ruling engine and its self-adaptive control method [J]. Chinese J Lasers, 2014, 41(6): 0608001.
李晓天, 于海利, 齐向东, 等. 光栅刻划机 300 nm 行程工作台研制及其自适应控制方法[J]. 中国激光, 2014, 41(6): 0608001.
- 17 G Schmahl, D Rudolph. Holographic Diffraction Gratings [M]. Sterne and Weltraum, 1976. 195-244.
- 18 T Namioka, M Koike. Aspheric wave-front recording optics for holographic gratings [J]. Appl Opt, 1995, 34(13): 2180-2186.
- 19 T Namioka, M Seya, H Noda. Design and performance of holographic concave grating [J]. Jpn J Appl Phys, 1976, 15(7): 1181-1197.
- 20 M Itou, T Harada, T Kita. Soft X-ray monochromator with a varied-space plane grating for synchrotron radiation: design and evaluation [J]. Appl Opt, 1989, 28(1): 146-153.
- 21 Lou Jun. Design and Fabrication of Variable-Line-Space Gratings and Its Application to Position Sensor [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2006.
楼 俊. 变间距光栅设计、制作及其在位移传感器中的应用研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2006.
- 22 Shi Feng, Wang Hui, Hu Fei, *et al.*. Analysis of Matlab Intelligent Algorithm in 30 Cases [M]. Beijing: Beihang University Press, 2011.
史 峰, 王 辉, 胡 斐, 等. Matlab 智能算法 30 个案例分析[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2011.
- 23 Ling Qing. Modeling and Optimization of Recording Optics for Varied Line Spacing Holographic Gratings [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2006.
凌 青. 变间距全息光栅记录光路的建模与优化[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2006.
- 24 Wang Donghui, Liu Lin, Zheng Puchao, *et al.*. Resolution analysis of varied line-space grating angular displacement sensor [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(6): 060501.
王东辉, 刘 林, 郑普超, 等. 变栅距光栅角位移传感器分辨率分析[J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(6): 060501.
- 25 Tong Yajun. Study of Precision Measurements of Monk-Gillieson Soft X-Ray Grating Monochromator and Offner Imaging Spectrometer [D]. Shanghai: Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, 2010.
佟亚军. Monk-Gillieson 软 X 射线光栅单色器精密测试及 Offner 成像光谱仪研究[D]. 上海: 中国科学院上海应用物理研究所, 2010.
- 26 Kong Peng, Tang Yuguang, Bayanheshig, *et al.*. Double-grating minitype flat-field holographic concave grating spectrograph [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(1): 0105001.
孔 鹏, 唐玉国, 巴音贺希格, 等. 双光栅切换微型平场全息凹面光栅光谱仪[J]. 光学学报, 2013, 33(1): 0105001.
- 27 Chen Qiang, Wang Qiuping, Yu Xiaojiang, *et al.*. The groove density measurement of VLS plane grating by diffraction method [J]. Nuclear Techniques, 2001, 24(7): 557-563.
陈 锵, 王秋平, 余小江, 等. 变间距全息光栅刻线密度函数的测试精度分析[J]. 核技术, 2001, 24(7): 557-563.