

小接收角同步辐射红外光束线的优化设计

朱化春 佟亚军 吉 特 彭蔚蔚 陈 敏* 肖体乔

中国科学院上海应用物理研究所上海光源, 上海 201204

摘要 对同步辐射红外光束线中由两个相同光学参数的超环面镜组成的对称式光学系统的像差和超环面镜缩放比之间的关系进行分析。计算结果表明,使用 3 倍压缩比的超环面镜可将上海光源同步辐射红外光束线站 BL06B 的 $500\ \mu\text{m}$ 波长的红外光在金刚石化学蒸汽沉积(CVD)窗上的透射率优化到 50%左右;光学设计软件 Zemax 光线追迹结果表明,该对称式结构的像差不影响中红外光束的聚集性能。Synchrotron Radiation Workshop 模拟计算结果表明,使用 3 倍压缩比的超环面镜和直径 15 mm 的金刚石 CVD 窗获得的光子通量与使用 1 倍压缩比的超环面镜和直径 45 mm 的金刚石 CVD 窗获得的光子通量相当,但前者的碳峰吸收约为后者的 37%。由两个 3 倍压缩比的超环面镜组成的对称式光学结构在兼顾近中红外性能的同时,优化了同步辐射红外光束线在远红外波段的性能。

关键词 光学设计; 同步辐射红外光束线; 优化设计; 像差; 衍射损失

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201636.1122002

Optimized Design for Synchrotron Radiation Infrared Beamline with Small Extraction Angle

Zhu Huachun Tong Yajun Ji Te Peng Weiwei Chen Min Xiao Tiqiao

Shanghai Source Radiation Facility, Shanghai Institute of Applied Physics,

Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China

Abstract The relationship for synchrotron radiation infrared beamline between the aberration of symmetric optical system formed by two toroidal mirrors with the same optical parameters and pantograph ratio of the toroidal mirrors is analyzed. Computation results show that toroidal mirror with 3:1 compression ratio can optimize the infrared beamline transmittance of chemical vapor deposition (CVD) windows to 50% at the working wavelength of $500\ \mu\text{m}$ on the Synchrotron Radiation Infrared beamline BL06B at Shanghai Synchrotron Radiation Facility. The ray trace results by the optical design software Zemax show that the aberrations of the symmetrical structure do not affect the aggregation performance of the infrared beamline. Synchrotron Radiation Workshop simulation results show that the photon flux obtained with a pair of three times compression ratio toroidal mirrors and a diameter of 15 mm CVD diamond window is equal to a pair of 1 time compression ratio toroidal mirrors and a diameter of 45 mm CVD diamond window, while the former carbon peak absorption is about 37% of the latter. The symmetric optical structure formed by two toroidal mirrors with 3 times compression ratio can be used to optimize the performance of the SRIR beamline in the far infrared wave band, while the performance in the near and middle infrared wave band are also take into account.

Key words optical design; synchrotron radiation infrared beamline; optimized design; aberration; diffraction loss

OCIS codes 220.1000; 190.4360; 260.3060; 120.4570; 050.1940

1 引 言

红外光谱法是生物学、化学、物理学和材料科学等研究中广泛应用的重要分析手段之一。同步辐射

收稿日期: 2016-05-10; 收到修改稿日期: 2016-08-15

基金项目: 国家自然科学基金(11475252)、国家自然科学基金青年科学基金(11405258)

作者简介: 朱化春(1981—),男,博士,助理研究员,主要从事红外束线技术及红外光谱显微应用方面的研究。

E-mail: zhuhuachun@sinap.ac.cn

* 通信联系人。E-mail: minchen@sinap.ac.cn

光在红外波段相对于常规热光源有 1~3 个量级以上的亮度优势。采用同步辐射红外光源,在红外光谱分析中可以得到更强的信号和更高的信噪比,极大地提高实验数据采集的效率和质量^[1]。同步辐射红外光谱学在生命科学和生物医学领域^[2-4]以及地质化学和环境科学研究^[5]、考古^[6]、半导体^[7]等方面都有广泛的用途。

除了在中红外和近红外波段,同步辐射在远红外波段相对于常规热光源也有 1~2 个量级以上的亮度优势^[8]。这弥补了在远红外波段缺少高强度光源的缺憾,为远红外波段的科学研究和应用提供了良好的平台。远红外波段包含着丰富的信息,凝聚态物质的声子频率、大分子(包括蛋白质等生物分子)的振动、分子间弱相互作用(如氢键、范德华力、偶极的旋转和振动跃迁)以及晶体中晶格的低频振动吸收也都对应于远红外波段^[7,9-10]。高亮度的同步红外辐射光源的出现使得这些研究工作的深入开展成为可能。

同步辐射红外光源是高能电子束与弯铁(BM)磁场作用而放出的红外辐射,同步辐射红外光的光子通量与光束线的接收角密切相关。而接收角由光源点到引出镜的距离和引出镜的大小决定。在上海光源(SSRF)二期红外光束线 BL06B 的设计时,红外光束线的接收角受储存环上二极磁铁的限制,无法开得更大以达到优化远红外波段的目的。BL06B 的接收角与上海光源的蛋白红外线站 BL01B 的接收角相同,只能做到 20 mrad(垂直)×40 mrad(水平)^[1,11],这使系统可接收到的远红外波段的通量受到限制。鉴于用户对远红外波段光子通量的迫切需求,因此需要尽可能地对系统在远红外波段的光子通量进行优化,以提升其在远红外波段的性能。

由于同步辐射储存环为超高真空,为了保证真空安全,使用化学气相沉淀(CVD)窗来隔离超高真空。由于远红外光的波长范围为 25~1000 μm ,其在金刚石 CVD 上的衍射光斑的大小由衍射极限决定,为 $d = 1.22\lambda/NA$,式中 λ 为波长,NA 为像方数值孔径。

理论上,有两种方法可用来减小红外光在 CVD 上的衍射损失,一是增大 CVD 的通光孔径,但为了保证隔离真空时的安全系数,CVD 的厚度与其直径成正比^[12],而碳吸收随厚度的增加而增强。因此会影响碳吸收峰位置的光谱强度,最终影响该波段的信噪比。为此,在光束线设计时需尽量减小 CVD 窗的直径。二是增大 CVD 前聚焦镜的物方数值孔径,可由两个途径实现:1)增大红外光束线的接收角,国际上多数红外光束线均使用此方法,可同时增大接收到的能量,但受到储存环上二极磁铁的限制,目前在上海光源无法做到;2)增加聚焦镜的缩放比(光源点到聚焦镜的距离 r 与聚焦镜到 CVD 的距离 r' 之比)。数值孔径增大可以减小衍射光斑尺寸从而减小因 CVD 窗直径较小造成的衍射损失,目前国际上只有法国 SOLEIL 同步辐射光源 AILES 线站采用了此方法,但是未给出具体的光学像差计算方法^[13]。

超环面镜是红外光束线中常用的光学元件,尤其是采用 1 倍的缩放比时,无像散和彗差,只有很小的残余球差^[14]。但如果增大超环面镜的压缩比,则会破坏其对称性,引入较为严重的像散、彗差和球差,使超环面镜的聚焦性能变差,如不予以矫正,则会使近中红外的聚焦光斑因像差而变大,影响其最终的光谱亮度。尤其在显微红外实验中,近中红外波段是重要的波段,其聚焦性能是影响空间分辨率和信噪比的主要因素,因此像差必须进行必要的矫正。

理论上,可使用另一相同参数的超环面镜与压缩超环面镜组成压缩缩放对称式光学结构,以消除部分垂轴像差(如像散和场曲等)和部分彗差^[15],但是球差会变为使用单个超环面镜时的两倍^[14,16]。超环面镜的压缩比增大,则该光学结构的球差亦会增大,需分析该系统的像差与超环面镜的压缩比之间的关系,以优化光学结构,使像差不影响中红外光的聚集性能。

本文给出了对称式超环面镜的像差和其中单个超环面镜的压缩比之间的关系,分别使用 SRW (Synchrotron Radiation Workshop)^[17]和光学设计软件 Zemax 对该光学设计方案进行了模拟计算和光学追迹。

2 原 理

由两个相同参数的超环面镜组成的对称式结构如图 1 所示,T1、T2 为超环面镜,SRIR 为光源点,BM 为弯铁,CVD 为金刚石 CVD 窗。超环面镜 T1 将同步辐射光源点发出的光压缩聚焦到 CVD 上,T2 的参数与 T1 相同,在聚焦传输同步辐射红外光的同时校正由 T1 带来的像差。光源点到超环面镜 T1 中心的距离为

r , 超环面镜 T1 的中心点到 CVD 的距离为 r' 。CVD 到超环面镜 T2 中心的距离为 r' , T2 中心到 T2 像点的距离为 r 。

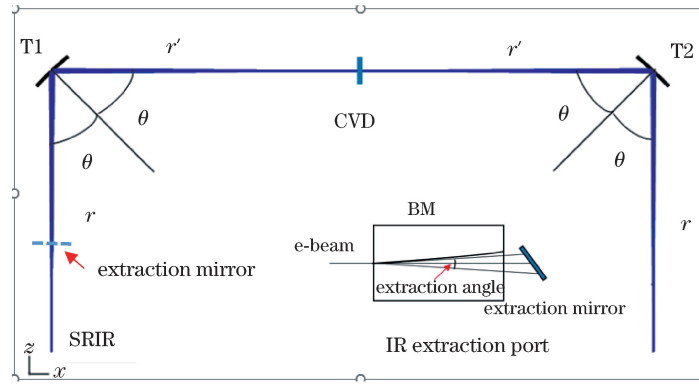


图 1 双超环面镜对称式光学结构

Fig. 1 Symmetrical optical structure of the double toroidal mirrors

令物距和像距的比值为 q , 即

$$r = qr', \quad (1)$$

因由两块相同参数的超环面镜组成压缩放大对称式光学结构的像差主要来自于球差, 根据超环面镜的像差公式^[18], 再考虑到该光学结构的对称性, 经过简单推导可得该光学系统的球差系数为

$$W_{400} = 2 \left[\frac{7(1-q)^2(1+q)}{16r^3} \sin^2(2\theta) - \frac{\cos^2\theta(1-q)^2(1+q)}{4r^3} \cos(2\theta) - \frac{\cos^4\theta(1+q)^3}{4r^3} \right], \quad (2)$$

$$W_{040} = 2 \left[-\frac{(1-q)^2(1+q)}{4r^3} \right], \quad (3)$$

$$W_{220} = 2 \left\{ \frac{3 \sin^2\theta}{4r^3} [(1-q)^2(1+q)] - \frac{\cos 2\theta}{4r^3} [(1-q)^2(1+q)] + \frac{(1+q)^3}{4r^3} \sin^2\theta \right\}, \quad (4)$$

所以该光学结构的波前像差为

$$W = \frac{1}{8}x^4W_{400} + \frac{1}{8}y^4W_{040} + \frac{1}{4}x^2y^2W_{220}. \quad (5)$$

在红外光束线的设计中, 为了调节和光路布局的方便, 使主光线和镜面中心法线的夹角为 45° , 超环面镜上光斑的大小可使用 r 和系统的两个方向的接收角 α_1, α_2 定义, 则子午方向的像差为

$$\delta_x = r \frac{d\omega}{dx} = \frac{1}{32}r(\omega_{400} \cdot \alpha_1^3 + \omega_{220} \cdot \alpha_1^2\alpha_2^2), \quad (6)$$

弧矢方向的像差为

$$\delta_y = r \frac{d\omega}{dy} = \frac{1}{32}r(\omega_{040} \cdot \alpha_2^3 + \omega_{220} \cdot \alpha_1^2\alpha_2), \quad (7)$$

式中

$$\omega_{400} = \frac{7(1-q)^2(1+q)}{4} - \frac{(1+q)^3}{4}, \quad (8)$$

$$\omega_{040} = -(q-1)^2(q+1), \quad (9)$$

$$\omega_{220} = \frac{3[(1-q)^2(1+q)] + (1+q)^3}{2}. \quad (10)$$

3 模 拟

3.1 CVD 上透射率和数值孔径之间的关系

考虑到红外光在 CVD 上的反射和衍射损失, 同步辐射红外光通过直径为 15 mm 的 CVD 窗时的透射率与波长和 NA 之间的关系如图 2 所示。图 2 中, 当 NA 为 0.01(计算中使之对应于 20 mrad \times 40 mrad 的接

收角)时,500 μm 的红外光在 CVD 上损失 90% 以上的能量;而当 NA 为 0.03 时,该波长的红外光在 CVD 上的衍射损失小于 50%,增加第一块聚焦镜的压缩比,可以减小远红外光在 CVD 上的能量损失。

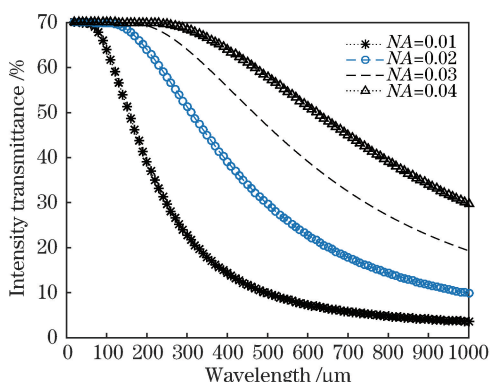


图 2 光强透射率和像方数值孔径之间的关系
Fig. 2 Intensity transmittance against imaging space NA

3.2 像差计算

由(6)、(7)式可知,像差和物距 r 成正比, r 增大,则像差增大;像差与接收角的 3 次方成正比,接收角变大,则像差变大(模拟计算中除做特殊说明外,均使用上海光源 BL06B 红外光束线的相关参数)。当子午和弧矢方向上的接收角分别为 40 mrad 和 20 mrad 且 r 为 4200 mm 时,该系统的像差和放大倍率之间的关系如图 3 所示,像差随着压缩比 q 的增大急剧增大。当 $q=3$ 时,系统的子午半径为 2970 mm,弧矢半径为 1485 mm,子午和弧矢方向上像差的均方根值可控制在 100 μm 以下,与使用光学设计软件 Zemax 追迹的几何半径相符,如图 3 所示。另外,使用 3 倍压缩比可将超环面镜 T1 的像方数值孔径提升到 0.03,可满足在使用较小的金刚石 CVD 窗的同时,提升同步辐射红外光的透射率要求,如图 2 所示($q=3$ 时, $NA=0.03$; $q=1$ 时, $NA=0.01$)。

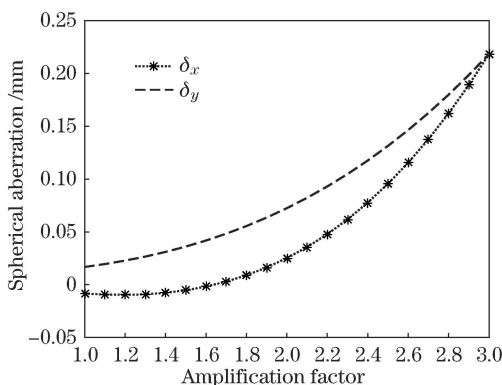


图 3 球差和放大倍率之间的关系
Fig. 3 Spherical aberration against amplification factor

超环面镜 T1 的物距 $r=4200$ mm 时,将水平方向的光斑放在超环面镜的子午方向,此时 Zemax 像差追迹结果如图 4 所示,T1 像点和 T2 像点的点列图分别如图 4(a)和(b)所示,该对称式光学结构最终的光斑大小为 99 μm ,约为单超环面镜 T1 光斑大小(1666 μm)的 6%。

在红外光束线的设计中,需要兼顾近中红外的性能,要求红外光谱学显微镜上的聚焦光斑达到衍射极限,则要求红外光在 T2 像点处的像差不超过其衍射极限和电子束团大小的卷积^[19],即

$$\sigma = [(M\sigma_{\text{diff}})^2 + (M\sigma_e)^2]^{1/2}, \quad (11)$$

式中 M 为系统的放大率, $\sigma_{\text{diff}} = \lambda / (4\pi 2\theta)$ 为衍射光斑的大小。因同步辐射红外光的垂直方向的张角受同步辐射光的波长和储存环偏转半径的限制,其关系为^[20]

$$\theta = \left(\frac{3\lambda}{4\pi\rho} \right)^{1/3}, \quad (12)$$

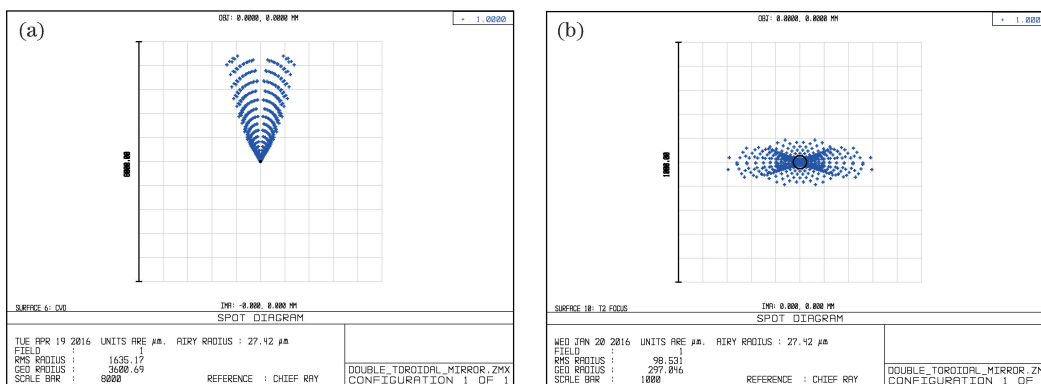


图 4 水平接收角方向与超环面镜的子午方向一致时的像差。(a) T1 像点的点列图;(b) T2 像点的点列图

Fig. 4 Aberration where horizontal extraction angle direction is agree with the meridian direction of the toroidal mirror.

(a) Spot diagram of T1 imaging point; (b) spot diagram of T2 imaging point

式中 θ 是红外光在垂直方向的张角, λ 是红外光波长, ρ 是偏转半径。代入上海光源的相关参数^[11], 可得 $1 \mu\text{m}$ 波长的红外光对应的垂直张角为 3 mrad , 则其衍射光斑的大小为 $13.4 \mu\text{m}$ ^[19]。 σ_e 为电子束的大小, 由加速器的参数决定, 代入上海光源电子束团的相关参数(表 1), 则可得电子束团和衍射决定的几何光斑的大小为 $190.6 \mu\text{m} \times 46.1 \mu\text{m}$ (半峰全宽值, 并假设光斑为高斯光斑), 此时该对称式光学结构的像差的点列图如图 5(b) 所示。如果只取系统衍射极限内的能量, 则有像差存在和无像差存在时, 聚焦光斑落在衍射光斑内的能量如图 6 所示, 在波长为 $2.5 \mu\text{m}$ 时, 衍射光斑内的能量与无像差系统相差 15% ; 在波长为 $5 \mu\text{m}$ 时, 衍射光斑内的能量与无像差系统相差 3% , 可见在中红外波段($2.5 \sim 25 \mu\text{m}$), 该光学结构的像差对红外光束聚集性能的影响很小。如果减小超环面镜 T1 和光源点之间的距离, 系统的像差可进一步减小。

表 1 上海光源的储存环和红外光束接收角参数

Table 1 Storage ring and extraction angle of infrared beamline parameters of SSRF

Beam energy /GeV	Circumference /m	Radius of curvature /m	Magnetic field /T	Horizontal emittance / (n/mrad)	Max current /mA	Horizontal beam size / μm	Vertical beam size / μm	Horizontal extraction angle /mrad	Vertical extraction angle /mrad
3.5	432	9.16	1.2726	3.90	300	80	19	40	20

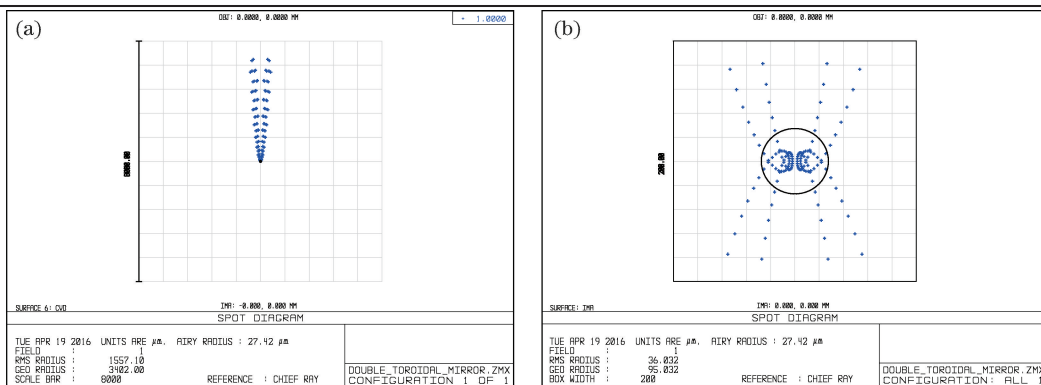


图 5 考虑到同步辐射垂直方向上的张角后的像差。(a) T1 像点的点列图;(b) T2 像点的点列图

Fig. 5 Aberration after considering the open angle at synchrotron radiation vertical direction.

(a) Spot diagram of T1 imaging point; (b) spot diagram of T2 imaging point

3.3 光子通量模拟计算

使用 SRW 和上海光源的 BL06B 的相关参数, 如表 1 所示。分别模拟计算了超环面镜 T1 的压缩比 $q=3$ 和 $q=1$ 时 CVD 上的光子通量, 其结果如表 2 所示。由表 2 可以看出, 使用 3 倍压缩比的超环面镜 T1 和 15 mm 通光直径的金刚石 CVD 窗与使用 1 倍压缩比超环面镜 T1 和 45 mm 通光直径的金刚石 CVD 窗所获取的光子通量相当, 但是在金刚石 CVD 窗的吸收峰上, 45 mm 直径的金刚石 CVD 窗造成的通量损失约为 15 mm 直径的金刚石 CVD 窗造成的通量损失的 2.7 倍(吸收峰最强位置), 如表 3 所示。

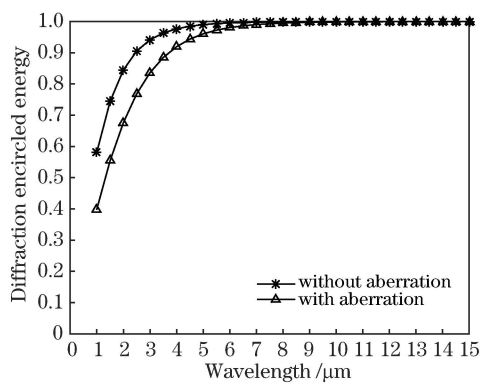


图 6 系统聚焦光斑落在的衍射光斑内的能量图

Fig. 6 Encircled energy of the system focus spot in diffraction spot

表 2 $q=3$ 和 $q=1$ 时金刚石 CVD 上通过的光子通量

Table 2 Photon flux transmitted by the diamond CVD where $q=3$ and $q=1$

Wavelength / μm	$q=3$ & Φ15 mm CVD window	$q=1$ & Φ45 mm CVD window
200	1.7×10^{13} photon/s/0.1% bandwidth	1.7×10^{13} photon/s/0.1% bandwidth
500	6.4×10^{12} photon/s/0.1% bandwidth	6.2×10^{12} photon/s/0.1% bandwidth

表 3 金刚石 CVD 窗造成的吸收损失

Table 3 Absorption loss caused by the diamond CVD window

	Φ15 mm CVD window	Φ45 mm CVD window
Thickness / μm	414	1242
Absorption loss / %	12	31.9

4 结 论

对由两个相同参数超环面镜组成的压缩放大对称式光学结构的像差和单个超环面镜的压缩比之间的关系进行了理论分析,使用 Zemax 光学设计软件和 SRW 对该光学结构进行了光线追迹和模拟计算。理论分析和模拟计算表明,由两个 3 倍压缩比的超环面镜组成的对称式光学结构可以实现:1)将上海光源红外光束线 BL06B 的 500 μm 工作波长的透射率优化到 47% 以上(使用 15 mm 直径的金刚石 CVD 真空窗);2)该光学结构的像差不影响红外光束的聚集性能。

SRW 模拟计算结果显示,使用两个 3:1 超环面镜组成的压缩放大对称式光学结构和通光直径为 15 mm 的金刚石 CVD 窗获得的光子通量与使用 1:1 的超环面镜和通光直径为 45 mm 的金刚石 CVD 窗获得的光子通量相当,但是 45 mm 的金刚石 CVD 窗难以加工,而且较厚,其碳吸收是 15 mm 金刚石 CVD 窗的 2.7 倍(碳吸收最大位置)。

在上海光源 BL01B 光束线站的设计过程中,主要优化了中红外波段的光子通量,同时兼顾远红外实验。BL06B 是上海光源目前正在设计的一条新的红外光束线,鉴于用户对于远红外光子通量的迫切需求,需在兼顾近中红外性能的同时尽可能地优化远红外波段的性能,结果表明采用一对超环面镜的对称式设计可以有效提高中远红外波段的传输效率。

参 考 文 献

- 1 Tong Y J, Ji T, Zhang Z Y, *et al.* The design and performance of infrared beamline at SSRF[C]. SPIE, 2013, 8910: 89101f.
- 2 Marcelli A, Cricenti A, Kwiatek W M, *et al.* Biological applications of synchrotron radiation infrared spectromicroscopy [J]. Biotechnology Advances, 2012, 30(6): 1390-1404.
- 3 McNaughton D. Synchrotron infrared spectroscopy in biology and biochemistry[J]. Aust Biochem, 2005, 36(1): 55-58.
- 4 Kong K V, Chew W, Lim L H, *et al.* Bioimaging in the mid-infrared using an organometallic carbonyl tag [J].

- Bioconjugate Chemistry, 2007, 18(5): 1370-1374.
- 5 Bernardina S D, Alabarse F, Kalinko A, *et al.* New experimental set-ups for studying nanoconfined water on the AILES beamline at SOLEIL[J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2014, 75: 154-161.
 - 6 Cotte M, Dumas P, Taniguchi Y, *et al.* Recent applications and current trends in cultural heritage science using synchrotron-based Fourier transform infrared micro-spectroscopy[J]. *Comptes Rendus Physique*, 2009, 10(7): 590-600.
 - 7 Bechtel H A, Muller E A, Olmon R L, *et al.* Ultrabroadband infrared nanospectroscopic imaging[C]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, 111(20): 7191-7196.
 - 8 Carr G L, Smith R J, Mihaly L, *et al.* High-resolution far-infrared spectroscopy at NSLS beamline U12IR[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2008, 51(5): 404-406.
 - 9 Fischer B M, Walther M, Jepsen P U. Far-infrared vibrational modes of DNA components studied by terahertz time-domain spectroscopy[J]. *Physics in Medicine and Biology*, 2002, 47(21): 3807-3814.
 - 10 Ferguson B, Zhang X C. Materials for terahertz science and technology[J]. *Nat Mater*, 2002, 1(1): 26-33.
 - 11 Ji T, Tong Y J, Zhu H C, *et al.* The status of the first infrared beamline at Shanghai Synchrotron Radiation Facility[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2015, 788: 116-121.
 - 12 Wild C. CVD diamond for optical windows[M]//Dischler B, Wild C. *Low-pressure synthetic diamond*. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 1998: 189-206.
 - 13 Roy P, Rouzies M, Qi Z M, *et al.* The AILES infrared beamline on the third generation synchrotron radiation facility SOLEIL[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2006, 49(1-2): 139-146.
 - 14 Malvezzi A M, Tondello G. Grazing incidence toroidal mirror pairs in imaging and spectroscopic applications[J]. *Appl Opt*, 1983, 22(16): 2444-2447.
 - 15 Aspnes D E. Imaging performance of mirror pairs for grazing-incidence applications: a comparison[J]. *Appl Opt*, 1982, 21(14): 2642-2646.
 - 16 Kingslake R, Johnson R B. Chapter 13 - Symmetrical double anastigmats with fixed stop[M]//Kingslake R, Johnson R B. *Lens design fundamentals*. Boston: Academic Press, 2010: 351-377.
 - 17 Chubar O, Fluerasu A, Berman L, *et al.* Wavefront propagation simulations for beamlines and experiments with "Synchrotron Radiation Workshop" [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2013, 425(16): 162001.
 - 18 Howells M R. Mirrors for synchrotron-radiation beamlines [M]//Schlachter A S, Wuilleumier F J. *New directions in research with third-generation soft X-ray synchrotron radiation sources*. Berlin: Springer Netherlands, 1994: 359-385.
 - 19 Moreno T. Optimized IR synchrotron beamline design[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2015, 22(5): 1163-1169.
 - 20 Duncan W D, Williams G P. Infrared synchrotron radiation from electron storage rings[J]. *Appl Opt*, 1983, 22(18): 2914-2923.