

椭圆反射式波带片光线追迹算法

杨祖华, 魏 来, 张强强, 陈 勇, 范全平, 巫殷忠, 曹磊峰

中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900

摘要 提出了一种基于光栅衍射原理的椭圆反射式波带片(ERZP)光线追迹算法,分析了 ERZP 的衍射聚焦和能谱分辨特性。基于该算法,将 ERZP 光线追迹模块添加到光学仿真软件 X-LAB 中,使之具有了计算量小、效率高等优点,这对含有 ERZP 光学系统的设计和数值模拟具有重要意义。

关键词 光计算; 光线追迹; 光栅; X 射线; 椭圆反射式波带片

中图分类号 O435 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201737.0920001

Ray-Tracing Algorithm of Elliptical Reflection Zone Plate

Yang Zuhua, Wei Lai, Zhang Qiangqiang, Chen Yong, Fan Quanping,

Wu Yinzong, Cao Leifeng

Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China

Abstract A ray-tracing algorithm of the elliptical reflection zone plate (ERZP) based on the grating diffraction theory is proposed, and the diffractive focusing and spectrally resolved properties of an ERZP are analyzed. Based on the proposed algorithm, the ERZP ray-tracing module is added in the optical simulation software X-LAB, which makes it possess the advantages of small computational cost and high efficiency. This is of great significance to the design and numerical simulation of optical systems with an ERZP.

Key words optics in computing; ray tracing; grating; X ray; elliptical reflecting zone plate

OCIS codes 200.1130; 240.6490

1 引 言

随着先进 X 射线源的发展, X 射线源的诊断显得十分重要,包括 X 射线的能谱测量、单色化以及优化聚焦等方面^[1-2]。椭圆反射式波带片(ERZP)可有效解决超快 X 射线源在光谱测量、单色化过程中遇到的问题^[3-5]。相较于其他具有同类应用的光学元件或光学系统, ERZP 的优势如下。1) 加工较容易, 仅需在衬底上喷上高反射率的材料, 同时, ERZP 的工作方式为反射式, 对厚度没有特殊要求; 相比于菲涅耳波带片聚焦受限于体衍射效应, ERZP 理论聚焦可以突破 10 nm 焦斑的极限^[6-8]。2) X 射线 ERZP 采用掠入射方式, 在相同最外环宽度下, 其有效聚焦焦斑远小于透射式菲涅耳波带片的。3) 在 X 射线单色化应用方面, 与传统的光栅单色仪相比, 仅用 ERZP 一个反射面便可实现光束的聚焦、色散, 因此 X 射线的传输效率更高, 能量损失更小, 而传统的光栅单色仪至少需要 4 个光学元件, 严重限制了传输后光源的应用率, 传输效率仅约为 ERZP 的 1/20^[9]。ERZP 的衍射属于全反射, X 光源的极化性质不会发生改变。同时, 采用离轴的工作方式可有效去除零级衍射光。总体而言, ERZP 是一种具有高空间分辨聚焦、高能谱分辨率以及优良去零级特性的光学元件, 已成功应用于超快软 X 射线光谱仪中^[10], 实现了单发能谱测量。与传统的软 X 射线光源聚焦技术相比, 基于 ERZP 的相关诊断设备, 如 KB(Kirkpatrick Baez) 镜聚焦系统, 将不再需要滤片、聚焦反射镜等昂贵的 X 射线光学元器件, 这样不仅简化了 X 射线诊断设备的结构, 而且大幅度提升了光源利用效率。

收稿日期: 2017-02-07; **收到修改稿日期:** 2017-03-15

基金项目: 国家自然科学基金(11375160)、国家重大仪器专项(2012YQ130125)

作者简介: 杨祖华(1987—), 男, 硕士, 助理研究员, 主要从事 X 射线诊断和光线追迹算法方面的研究。

E-mail: 20063274@cqu.edu.cn

然而,利用标量衍射理论算法模拟反射式波带片,模拟工作量大,计算时间长,不适用于具有一定空间分布、角分布和能谱分布的大面积 ERZP 光学系统的模拟^[11,12]。本文提出了一种基于光栅原理的光线追迹算法,可有效模拟分析 ERZP 的衍射特性。无论是可见光波段还是 X 射线波段的光学系统设计和仿真都离不开光线追迹算法^[13-14],ERZP 的光线追迹算法模块已添加到光学仿真软件 X-LAB 中。

2 理论模型

2.1 ERZP 结构及工作原理

ERZP 由 Michette 等^[7]提出,如图 1 所示,其结构由一系列非同心椭圆构成,表达式为

$$\left(z_N + \frac{N\lambda \cos \theta}{2v \sin^2 \theta}\right)^2 + \frac{x_N^2}{\sin^2 \theta} = \frac{Nf\lambda}{\sin^2 \theta}, \quad (1)$$

$$v = \frac{R_1/R_2 + 1}{R_1/R_2 - 1}, \quad (2)$$

式中 R_1 和 R_2 分别为物距和像距, f 为焦距, θ 为掠入射角, λ 为设计的中心波长, N 为环带数, x_N 、 z_N 分别为第 N 条环带的坐标。

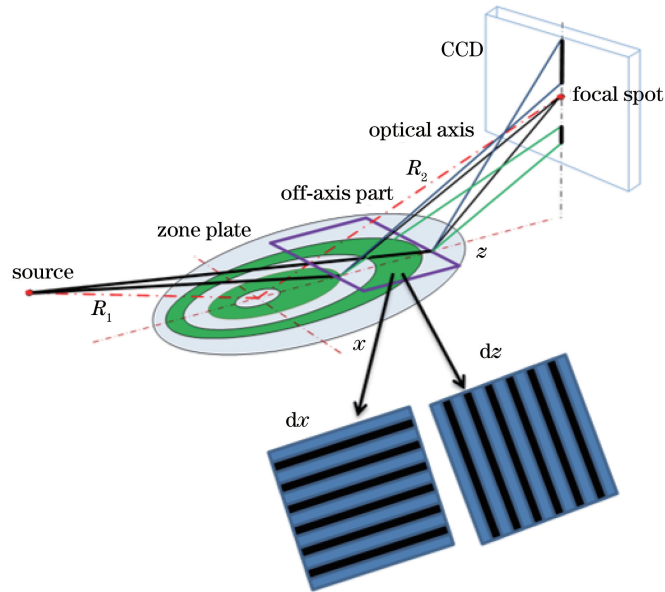


图 1 离轴 ERZP 聚焦和谱分析原理图

Fig. 1 Schematic for focusing and spectral analysis principle of off-axis ERZP

设计的椭圆结构满足菲涅耳半波带条件,波带片可看作是子午及弧矢方向光栅的叠加,如图 1 中的 dx 和 dz 方向所示,这两个方向的衍射都需要满足光栅方程:

$$\cos \theta - \cos \beta = m\lambda\sigma, \quad (3)$$

式中 σ 为光栅线密度(即波带片子午或弧矢方向的线密度), β 为掠衍射角, m 为衍射级数(整数)。由于设计的 ERZP 结构基于点对点成像,因此仅适合于有限大小光源成像。沿 ERZP 的子午方向取波带片离轴的某一部分以有效去除零级光干扰,离轴波带片的示意图如图 1 所示,零级衍射光和 +1 级衍射光的聚焦成像完全分开。满足设计波长的入射光将会成像到理想的聚焦位置,而偏离设计波长的入射光会偏离理想聚焦位置,不同波长的入射光将聚焦在光轴的不同位置,因此 ERZP 具有色散功能,即“彩虹”效应。ERZP 可看作是子午及弧矢方向光栅的有效叠加,因此其具有子午和弧矢方向的聚焦特性,其中子午方向的“光栅”决定谱分辨能力,弧矢方向的“光栅”决定空间聚焦能力。

2.2 光栅衍射光线追迹基本原理

折射、反射光学元件均满足 Snell 定理,其矢量表达式为

$$n' \mathbf{S}' \times \mathbf{r} = n \mathbf{S} \times \mathbf{r}, \quad (4)$$

式中 \mathbf{S} 和 \mathbf{S}' 分别为入射及折射/反射光线的方向余弦向量, 分别用 (k, l, m) 和 (k', l', m') 表示。 \mathbf{r} 为折射或反射面的法线向量, 以 (K, L, M) 表示。 n 和 n' 分别代表入射光线和出射光线所在介质的折射率(取 $n' = n$)。

在费马原理的条件下, 基于 Snell 定理, 光栅衍射原理满足

$$\mathbf{S}' \times \mathbf{r} = \mathbf{S} \times \mathbf{r} + N\lambda\sigma\mathbf{q}, \quad (5)$$

式中 \mathbf{q} 为光栅刻线方向的单位向量。当(5)式中的 $N=0$ (即零级出射)时, (5)式可变换为(4)式。

令 $C = N\lambda\sigma$, (5)式简化为

$$(\mathbf{S}' - \mathbf{S} + C\mathbf{p}) \times \mathbf{r} = 0, \quad (6)$$

式中 \mathbf{p} 为垂直于光栅刻线方向(即光栅的周期方向)的单位向量。因此, 若已知入射波长、衍射级次、光栅线密度以及光栅的法线矢量, 便可获得该衍射级次的衍射光线。光栅衍射特性表现为: 所有的衍射级次均在一个以光栅刻线(即光栅周期方向的垂直方向)为轴, 以零级光线与光栅刻线方向夹角(γ)为半角的锥上, 如图 2 所示, 其中 α 为 ERZP 出射光的最大锥角。

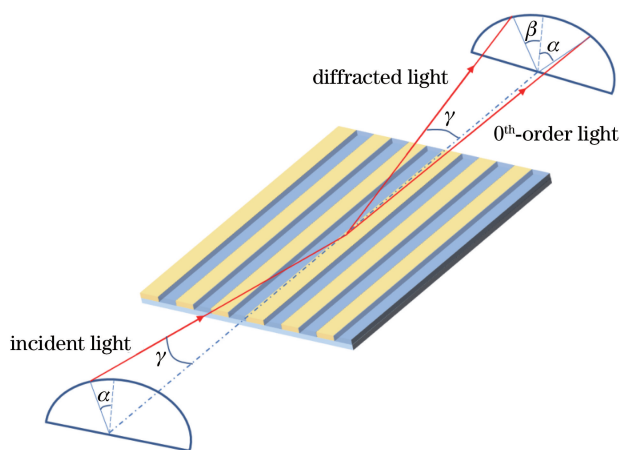


图 2 光栅锥形结构衍射示意图

Fig. 2 Schematic of conical diffraction of gratings

3 ERZP 参数设计及分析

3.1 ERZP 参数设计

为研究 ERZP 的色散及聚焦特性, 设计了一个参数完备的 ERZP: 物距 R_1 、像距 R_2 分别为 40 mm、160 mm; 中心波长为 2.366 nm(能量为 524 eV, 氧元素的 K 线); 考虑到软 X 射线的反射率与金属材料的关系, 为满足全反射条件, 设计掠入射角 θ 为 3.5° ; 工作在一级衍射条件下, 为了消除零级衍射光对一级衍射光的影响, 截取 ERZP 的一部分, 其中子午方向与 ERZP 中心之间的距离 L_p 为 70~110 mm, 即子午方向 ERZP 的有效长度 $L = 40$ mm(有效环数约为 10000), 弧矢方向长度取 0.4 mm。结构和参数示意图如图 3 所示。离轴 ERZP 的微结构表现为暗环(不反射的环带)和白环(高反射环带)交替变化, 利用软件 X-LAB

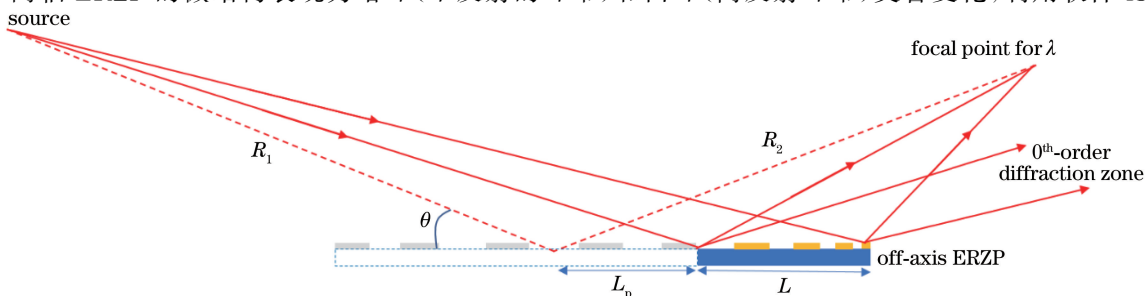


图 3 ERZP 结构参数示意图

Fig. 3 Schematic of structural parameters of ERZP

绘制的离轴 ERZP 局部微结构如图 4 所示。

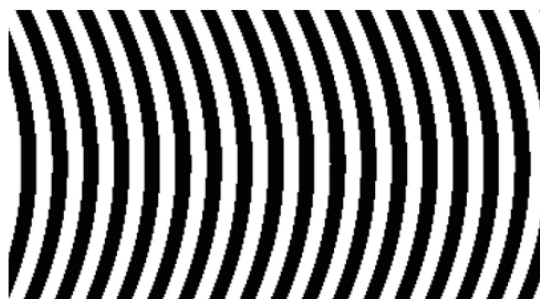


图 4 离轴 ERZP 局部微结构
Fig. 4 Local micro-structure of off-axis ERZP

3.2 ERZP 参数分析

当入射到 ERZP 的光源为理想点光源时,其空间和谱方向的数值孔径 N_A 分别决定其聚焦性和谱分辨特性,计算公式为

$$N_A = \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (7)$$

在上述参数下,所设计的 ERZP 的子午方向和弧矢方向出射光束的数值孔径 N_A 分别为 0.043 和 0.004。矩形孔的瑞利判据为

$$r_{es} = \frac{0.5\lambda}{N_A}. \quad (8)$$

由(8)式可得,所设计的 ERZP 子午、弧矢方向的空间分辨分别约为 $0.03 \mu\text{m}$ 、 $0.3 \mu\text{m}$,能谱分辨率的理论值约为 5000。

4 ERZP 衍射特性光线追迹模拟

模拟所用光线数均为 10000,模拟平台为普通的计算机。利用光栅原理开展 ERZP 光线追迹模拟具有对平台要求低、计算量小、计算时间少等特点。而基于标量衍射原理的模拟,其环带数不能超过 2000,不能模拟一定尺寸光源条件下的 ERZP 衍射特性。

4.1 空间聚焦特性

为了探究 ERZP 的空间聚焦特点,采用理想点光源,且光源位于设计的位置上,在上述 ERZP 参数下,模拟获得了探测平面(预定的聚焦平面)上的像,其聚焦特性如图 5(a)所示。可以看出,理想的点光源所成像几乎为理想的像点,表现为点到点的聚焦特征。

此外,进一步模拟分析了有限尺寸光源下 ERZP 的聚焦情况,采用均匀分布的矩形光源,其发散角能完全覆盖所设计的 ERZP,光源在竖直方向和水平方向的尺寸分别 $40 \mu\text{m}$ 和 $20 \mu\text{m}$ 。模拟获得了探测平面(预

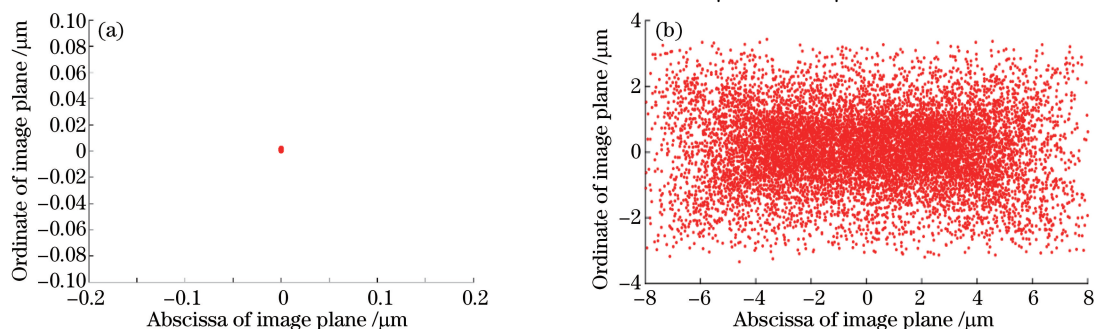


图 5 不同光源下像平面上的聚焦特性。(a)理想点光源;(b)有限尺寸大小光源
Fig. 5 Focusing properties on image plane under different light sources. (a) Ideal point source;
(b) light source with finite dimension

定的聚焦平面)上的像,其聚焦特性如图 5(b)所示。由模拟结果可知,像的光强分布也为矩形分布,中间部分的像光强比外围的更强,这是由 ERZP 聚焦作用所引起的;由物像距离的关系可知,空间方向的放大率为 0.8,空间方向的聚焦尺寸约为 $16 \mu\text{m}$,与理论计算结果一致。

4.2 能谱分辨特性

在前述条件下,采用有限大小的矩形光源,进行了两组复色光源的模拟,获得了所设计的 ERZP 的谱分辨特性。能谱分辨定义为:两条谱线由于色散而分开,谱线间的距离正好使一条谱线的强度极大值与另一条谱线的强度极小值重合,则认为两条谱线可以分辨。模拟结果如图 6(a)所示,从上至下三个光斑对应的光子能量分别为 525, 524, 523 eV,可以看出,三个能量的光谱能够完全分开。图 6(b)所示为三个能量更加接近的光谱的模拟结果,从上至下三个光斑对应的光子能量分别为 524.5, 524, 523.5 eV,三个能量的光谱恰好能分开。由此可知,谱分辨率为 1048,相应的线色散率为 $9.5 \text{ mm} \cdot \text{eV}^{-1}$ 。仿真结果与参考文献[9]的结果相符,该方法有效解决了含有 ERZP 元件的光学系统的设计和模拟问题。

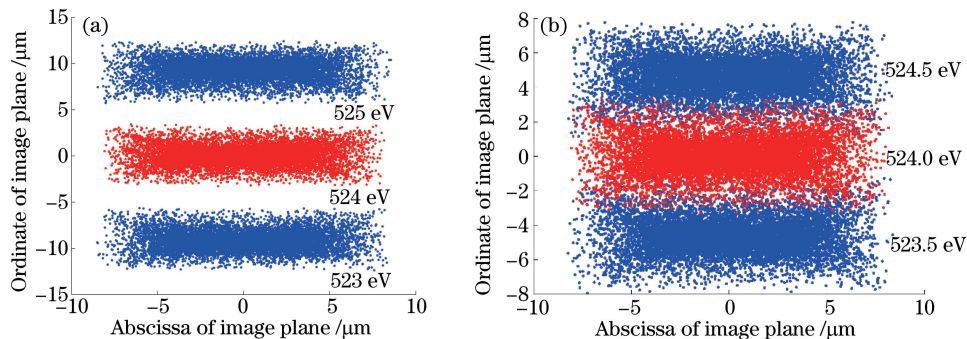


图 6 两组复色光源的模拟结果。(a) 525, 524, 523 eV; (b) 524.5, 524, 523.5 eV

Fig. 6 Simulated results of two groups of polychromatic light sources. (a) 525, 524, 523 eV; (b) 524.5, 524, 523.5 eV

光子能量偏离设计的波带片对应的光子能量越远,探测面上的光斑越大,因此,设计的 ERZP 对应一个较窄的有效能谱范围,可通过制作阵列式 ERZP 来研制宽能谱、高能谱分辨率的光谱仪。

5 结 论

ERZP 是一种具有优良空间聚焦、能谱分辨特性且加工容易的 X 射线光学元件,提出了基于光栅衍射原理的 ERZP 光线追迹算法,极大地降低了对计算机性能的要求,减少了模拟计算的时间,为设计、分析 ERZP 提供了一个极其高效的方法。该算法可有效应用于菲涅耳波带片性能的模拟分析中。

参 考 文 献

- [1] Thomas A G R, Krushelnick K. Betatron X-ray generation from electrons accelerated in a plasma cavity in the presence of laser fields[J]. *Physics of Plasmas*, 2009, 16(10): 103103.
- [2] Fourmaux S, Corde S, Phuoc K T, *et al.* Demonstration of the synchrotron-type spectrum of laser-produced betatron radiation[J]. *New Journal of Physics*, 2011, 13(3): 033017.
- [3] Wilhein T, Hambach D, Niemann B, *et al.* Off-axis reflection zone plate for quantitative soft X-ray source characterization[J]. *Applied Physics Letters*, 1997, 71(2): 190-192.
- [4] Erko A, Firsov A. High-resolution diffraction X-ray optics [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2007, 15(12): 1816-1822.
- [5] Schneider G. Zone plates with high efficiency in high orders of diffraction described by dynamical theory[J]. *Applied Physics Letters*, 1997, 71(16): 2242-2244.
- [6] Suzuki Y, Takeuchi A, Takano H, *et al.* X-ray imaging microscopy using Fresnel zone plate objective and quasimonochromatic undulator radiation[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2004, 75(4): 1155-1157.
- [7] Michette A G, Pfauntsch S J, Erko A, *et al.* Nanometer focusing of X-rays with modified reflection zone plates[J]. *Optics Communications*, 2005, 245(1): 249-253.
- [8] Chao W L, Kim J, Rekawa S, *et al.* Hydrogen silsesquioxane double patterning process for 12 nm resolution X-ray

- zone plates[J]. Journal of Vacuum Science and Technology B, 2009, 27(6): 2606-2611.
- [9] Erko A, Firsov A A, Senf F. Novel parallel vacuum ultra-violet/X-ray fluorescence spectrometer[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2012, 67(1): 57-63.
- [10] Erko A, Firsov A, Holldack K. New developments in femtosecond soft X-ray spectroscopy [J]. AIP Conference Proceedings, 2010, 1234(1): 177-180.
- [11] Fan Wei, Cao Leifeng, Wei Lai, *et al.* Numerical calculation of focusing properties of quasi-random-dot-array binary Gabor zone plate[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2010, 23(1): 1001-4322.
范 伟, 曹磊峰, 魏 来, 等. 准随机点阵二值化 Gabor 波带片聚焦特性的数值计算 [J]. 强激光与粒子束, 2010, 23(1): 1001-4322.
- [12] Yang Z H, Zhao Z Q, Wei L, *et al.* Design of elliptical reflection zone plate for monochromatization of the ultrafast betatron radiation at low energy band[J]. Chinese Physics Letters, 2014, 31(5): 050701.
- [13] Hao Jian, Jing Lei, Wang Yao, *et al.* Design of uniform illumination for array LED[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(10): 1022003.
郝 剑, 荆 雷, 王 尧, 等. 阵列型紫外 LED 匀光照明系统设计 [J]. 光学学报, 2015, 35(10): 1022003.
- [14] Zhao Dachun, Chen Bo, Liu Peng, *et al.* Image quality evaluation of Wolter X-ray nested telescope[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(3): 0311002.
赵大春, 陈 波, 刘 鹏, 等. Wolter 型 X 射线嵌套望远镜成像质量分析 [J]. 光学学报, 2016, 36(3): 0311002.