文章编号　2095-1531(2014)01-0105-07

前置平面镜热负载对变包含角平面光栅单色器分辨率的影响

宋　源[1,2],卢启鹏[1*],彭忠琦[1],龚学鹏[1]
(1. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室,吉林 长春 130033;
2. 中国科学院大学,北京 100049)

摘要:针对变包含角平面光栅单色器前置平面镜(PM)受热负载而导致的单色器分辨率降低问题,提出优化聚焦常数(C_{ff})补偿分辨率的方法。首先,计算不同 C_{ff} 值时 PM 的热功率吸收谱,在此基础上对镜面热负载进行热-结构耦合分析,得到不同热负载时 PM 表面热变形的变化量;然后,结合理想分辨率公式和光线追迹软件求出加热负载的单色器分辨率;最后,优化 C_{ff} 实现分辨率的补偿。研究结果表明,以软 X 射线谱学显微光束线站为例,当出射光能量为 1 000 eV 时,将 C_{ff} 由 1.8 优化至 1.84,单色器分辨率即可与无热负载时的相同,该优化方法可有效补偿单色器分辨率的降低。

关　键　词:变包含角平面光栅单色器;热负载;聚焦常数;分辨率;斜率误差
中图分类号:TH744.1; TB24　　**文献标识码**:A　　doi:10.3788/CO.20140701.0105

Effects of plane mirror thermal load on variable included angle plane-grating monochromator resolution

SONG Yuan[1,2], LU Qi-peng[1*], PENG Zhong-qi[1], GONG Xue-peng[1]
(1. *State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun* 130033, *China*;
2. *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049, *China*)
* *Corresponding author, E-mail: luqipeng@126.com*

Abstract: In synchrotron radiation beamlines, the increasing light flux will lead to more thermal load on optical elements. The thermal load on the Plane Mirror(PM) of variable included angle plane-grating monochromator will decrease the resolution. This paper proposes a method to recover the resolution by optimizing the value of focusing constant(C_{ff}). Firstly, the absorption spectra of thermal power with different values of C_{ff} are obtained by calculation. Then thermo-mechanical analysis of PM is conducted to get variable deformations on PM with different thermal power. Secondly, the resolution is calculated by combining the function of ideal resolution and the software of ray tracing. Finally, the resolution is compensated by optimizing C_{ff}. The result indicates that taking the soft X-ray spectroscopy micro beam line station of SSRF for example, the resolution can be improved by changing the value of C_{ff} from 1.8 to 1.84 when the photon energy is 1 000 eV. So optimizing

收稿日期:2013-09-11;**修订日期**:2013-12-13
基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 11079035);国家科技重大专项资助项目(No. 2012ZX02702001);应用光学国家重点实验室开放基金资助项目(No. Y2Q03FQK02)

the value of C_{ff} is an effective way to recover the decreased resolution induced by thermal power on PM.

Key words: variable included angle plane grating monochromator; thermal load; focusing constant (C_{ff}); resolution; slope error

1 引　言

同步辐射是电子以接近光速做圆周运动或蛇形运动,在改变运动方向时,沿着运动轨道切线方向发出的电磁辐射。同步辐射光源凭借从红外、紫外、软X射线(200~0.4 nm)到硬X射线(0.4~0.01 nm)宽光谱的优越性能,已广泛应用于基础科学和应用研究领域[1-2]。20世纪70年代,起源于同步加速器,依托于高能物理学装置的第一代光源诞生,如美国的SPEAR、俄罗斯的VEPP-3和德国的DORIS等。随后在80年代后期,为了获得高品质的辐射光,设计制造了专用的光源加速器,称为第二代光源,如英国的SRS、美国的NSLS和日本的UVSOR等。自90年代以来,为了满足实验需要,具有高通量、高耀度和高强度的第三代同步辐射光源应运而生,其中于2009年建成投入使用的上海同步辐射光源(SSRF)是世界上最先进的第三代同步辐射光源之一。为了高效利用并获得高分辨率的单色光,采用单色器作为分光装置[3-5],在众多单色器中,变包含角平面光栅单色器(VAPGM)凭借其优异性能,已在同步辐射装置中得到广泛应用。由于光源光通量的大幅提高,导致光束线中光学元件承受较大热负载[6],造成表面热变形,进而影响单色器分辨率。为减小热负载造成的影响,对耐高温光学元件的材料和热缓释技术等方面进行了研究,并取得一定成果,但受到光学材料和冷却效率的限制,热负载在一定程度上仍会造成光学元件表面热变形[1]。在变包含角平面光栅单色器中,前置平面镜(PM)因受热负载而产生热变形,会导致单色器的分辨率下降。而聚焦常数(C_{ff})是影响单色器分辨率的一个重要因素。

本文以SSRF软X射线谱学显微光束线站为研究对象,首先计算PM表面在不同条件下的热功率吸收谱,并运用有限元方法研究了PM的热负载产生的斜率误差,通过理想分辨率公式和光线追迹软件计算分辨率,最后优化C_{ff}值,提高单色器分辨率。该方法为变包含角平面光栅单色器在热负载条件下合理选择C_{ff}提供了理论依据。

2 聚焦常数对分辨率的影响

C_{ff}是变包角平面光栅单色器的特性参数,是连接光栅成像和衍射的条件因子。

变包含角平面光栅单色器的工作原理:光学系统由PM与平面光栅(PG)组成,PM通过离轴转动的方式,PG绕自身中心转动,通过两个光学元件的同时转动,用来实现转动和平动的复合运动,进而改变包含角($2\theta=\alpha-\beta$),可达到波长选择的目的[7]。

由光栅聚焦方程:

$$\frac{\cos^2\alpha}{r}-\frac{\cos\alpha}{R}+\frac{\cos^2\beta}{r'}-\frac{\cos\beta}{R}=0\,. \tag{1}$$

平面光栅的曲率半径$R=\infty$,可得:

$$r'=-r\cdot\left(\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\right)^2=-r\cdot C_{ff}^2, \tag{2}$$

式中:α为光栅的入射角,β为光栅的衍射角,r为入射臂长度,r'为出射臂长度。定义:

$$C_{ff}=\cos\beta/\cos\alpha\ , \tag{3}$$

式中,C_{ff}称为平面光栅的聚焦常数[8]。

单色器分辨率的影响因素包括:光源尺寸或入缝垂直开口S_{en};出缝垂直开口S_{ex};前置准直镜面形误差$\sigma_{\rho0}$;光栅面形误差σ_{gr};后置聚焦镜面形误差σ_{f0}[9]。假设上述各项误差呈高斯分布,则分辨率R为:

$$\frac{1}{R^2}\approx\frac{1}{\lambda mN(C_{ff}^2-1)}\left(\frac{2S_{en}^2}{r_{en}^2}+8\sigma_{gr}^2+8\sigma_{f0}^2C_{ff}^2\right)+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\lambda mN(C_{ff}^2-1)}}\left[\sigma_{f0}^2(C_{ff}^2+1)+\frac{S_{ex}^2C_{ff}}{r_{ex}^2}\right]\ , \tag{4}$$

式中,r_{en}为光源(入缝)与光栅之间的距离,r_{ex}为光栅与出缝之间的距离。

从式(4)中可以看出,C_{ff}与分辨率存在对应

关系。选择适当的 C_{ff}值,可以改变单色器的工作模式,如高分辨率工作模式需选择大值 C_{ff};高次谐波抑制模式选择小值 C_{ff},但会影响输出通量[10]。因为 C_{ff}具有上述改变单色器分辨率的性质,所以在一定范围内通过优化 C_{ff}达到补偿分辨率的目的。

3　前置平面镜热负载对分辨率的影响

3.1　聚焦常数与前置平面镜热负载的关系

相对前两代光源,第三代光源光通量得到显著提高,光学元件表面的热负载明显增大;虽然应用了热缓释技术,但并不能完全吸收热载荷,剩余热载荷带来的热变形仍会降低单色器分辨率。在 VAPGM 结构中,PM 最先接受同步辐射光, 吸收了大部分的热载荷,PG 的热功率吸收量比 PM 的小很多,因此本文主要分析 PM 表面的热负载来优化 C_{ff},以下为具体分析过程。

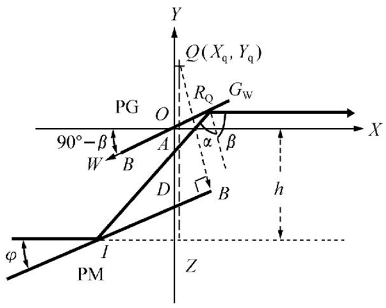


图 1　变包含角平面光栅单色器工作原理图

Fig. 1　Principle diagram of variable included angle plane-grating-monochromator

C_{ff}值决定了 α、β 和光斑面积等相关参数值的大小,因此,通过图 1 所示的几何关系,以及结合 PM 离轴转动的方式,得到以下受 C_{ff}限制的各参数值公式:

PM 的掠入射角为 :

$$\varphi = \frac{1}{2}[\pi - (\alpha - \beta)] . \tag{5}$$

DB 为镜子边缘与转轴 Q 在镜面垂足之间的距离,IB 为光斑入射点与转动中心垂足点的距离,ID 为所要求的光斑在 PM 的相对位置。得到:

$$ID = IB - DB . \tag{6}$$

光斑在 PM 上大小为:

$$S = 0.08(\mathrm{mrad}) \times \frac{32(m)}{\sin\varphi} . \tag{7}$$

单色器出射光子能量选择范围为 250 ~ 2 000 eV,本文选择光子能量为 1 000 eV 作为代表进行研究 。

当出射光子能量 $e = 1\ 000$ eV 时,选择镀 Au 膜的衍射光栅,光栅刻线密度 $N = 1\ 200$ L/mm,衍射级次 $m = 1$。取不同 C_{ff}值,根据式(5) ~ (7)计算得到不同 C_{ff}时 PM 的入射角、入射光斑的大小和光斑入射位置等数据,如表 1 所示。

从表 1 中得到,随着 C_{ff}从 1.6 到 2.5 的逐渐增大,平面光栅入射角也逐渐从 87.502°增大到88.638°;平面光栅衍射角虽也增大,但增大的幅

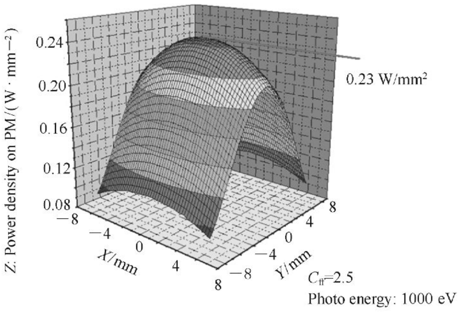
表 1　各 C_{ff}对应的参数值

Tab. 1　Various parameters corresponding to different value of C_{ff}

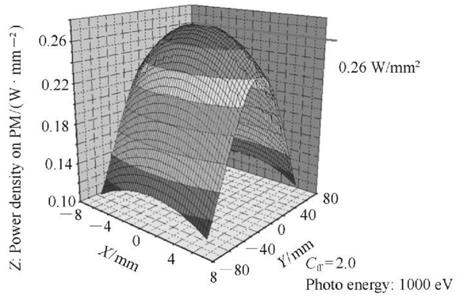
C_{ff}	平面光栅入射角/(°)	平面光栅衍射角/(°)	PM 入射角/(°)	ID/mm	光斑大小/mm^2
1.6	87.502	86.001	86.751	137.545	45.174
1.7	87.730	86.140	86.935	153.334	47.877
1.8	87.915	86.245	87.080	167.240	50.257
1.9	88.068	86.328	87.198	179.622	52.375
2.0	88.198	86.395	87.297	190.744	54.278
2.1	88.310	86.450	87.380	200.809	55.999
2.2	88.408	86.495	87.451	209.972	57.566
2.3	88.493	86.533	87.513	218.359	59.000
2.4	88.570	86.565	87.568	226.071	60.319
2.5	88.638	86.593	87.616	233.191	61.536

度明显小于入射角的幅度,从 86.001°变化到 86.593°;前置平面镜的入射角的变化趋势也是逐渐增加,由 86.751°变大到 87.616°;前置平面镜表面光斑从 45.174 mm^2 增加到 61.536 mm^2,入射光会从平面镜中心一侧进入另一侧。

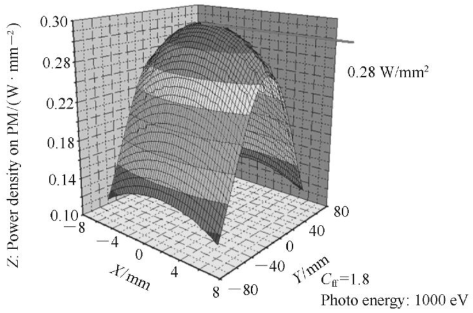
根据表 1 中的数据和上海光源的光源参数,利用 SPECTRA 8.0 分析软件计算 PM 垂直热功率吸收谱具体值[11-12],再按反射面与水平面夹角将功率密度投影到反射面,如图 2 所示。分别展示 C_{ff} 为 2.5、2.0 和 1.8 时,前置平面镜的吸收功率谱,最高吸收功率分别为 0.23、0.26 和 0.28 W/mm^2,即在相同出射光能量下,随着 C_{ff} 取值的逐渐减小,PM 表面的热吸收功率逐渐增大。



(a) C_{ff}=2.5



(b) C_{ff}=2.0



(c) C_{ff}=1.8

图 2 出射光子能量 e = 1 000 eV 时,不同 C_{ff} 数情况下的热功率吸收密度谱

Fig. 2 Absorption spectra of thermal power with different values of C_{ff} (e = 1 000 eV)

利用 ANSYS 软件对 PM 做热-结构耦合分析[13-14]。将热功率吸收密度谱作为热载荷直接加载到有限元模型中。模型按照实体建模,采用直接内部水冷,通入恒温 30 ℃冷却水,并用六面体实体单元进行网格划分。最后得到 PM 子午方向上热变形的分布,图 3 中展示了当 C_{ff} 取 2.5 时,PM 表面热变形的分布情况。PM 表面最大的热变形主要发生在光斑照射处的中心,从中心向两端逐渐减小,在光斑范围外热变形急剧减小并趋于 0。

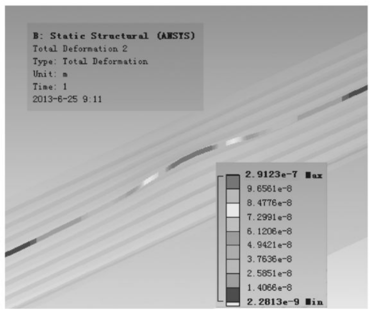


图 3 当 C_{ff} = 2.5, e = 1 000 eV 时子午方向 PM 表面热变形分布

Fig. 3 Deformation of PM in the meridian direction (C_{ff} = 2.5, e = 1 000 eV)

图 4 为取不同 C_{ff} 值时 PM 子午方向热变形曲线对比图。对比表明,随着 C_{ff} 从 1.6 变化到 2.5,光斑入射到镜面的相对位置逐渐增大,从

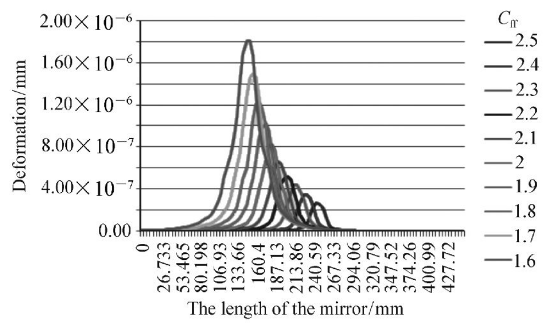


图 4 当 e = 1 000 eV 取不同 C_{ff} 值时 PM 表面热变形量的对比图

Fig. 4 Deformation of PM for different values of C_{ff} (e = 1 000 eV)

137.54 mm增大到 233.19 mm；PM 表面最大变形量从 1.81×10^{-6} mm 逐渐减小到 2.9×10^{-7} mm。

图 5 表示 C_{ff}与 PM 表面斜率误差之间的变化关系[15-16]。当 C_{ff}从 1.6 增加到 2.5，各表面最大斜率误差绝对值从 7.9×10^{-6} rad 减小到 1.2×10^{-6} rad，峰谷差值在 C_{ff}取 1.6 时最大，2.5 时最小。

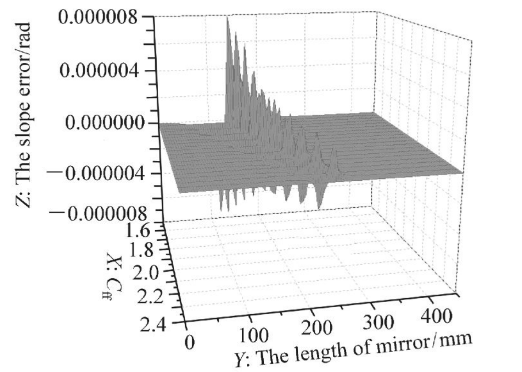


图 5　当 $e = 1\ 000$ eV 取不同 C_{ff}值时 PM 表面斜率误差的变化

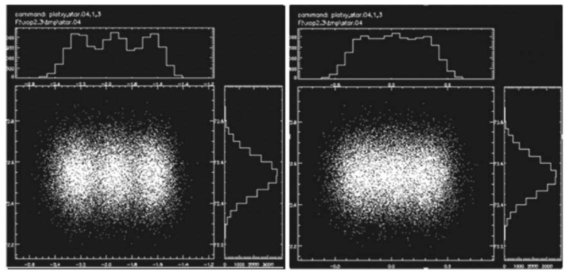
Fig. 5　Slope errors of PM for different values of C_{ff} ($e = 1\ 000$ eV)

3.2　聚焦常数的优化

经过研究发现，聚焦常数、热负载和分辨率三者之间存在相互制约关系，因此，通过分析制约关系可以确定分辨率的大小，求出热负载的影响，再优化 C_{ff} 值，最后用追迹方法对优化值进行评价[17]。现需将斜率误差因子加入到分辨率公式中，就能够达到优化聚焦常数的目的，进而补偿单色器分辨率。

以出射光子能量 1 000 eV 为例，用 XOP2.3 软件分别追迹当 $C_{ff} = 1.8$、$m = 1$ 时无热负载和有热负载两种情况，计算分辨率的变化大小。如图 6所示，(a) 为在无热负载条件下，追迹了光子能量分别为 999.93、1 000 和 1 000.07 eV 时，光斑在出射狭缝处的追迹结果，计算此时分辨率大小为 14 300。(b) 为在有热负载条件下，其他条件均与(a)相同，追迹得到的追迹结果。

从图 6 中(a)和(b)对比可看出，PM 表面加载热负载后分辨率明显下降，用 XOP2.3 对加载热负载后的光路追迹，并求出此时的分辨率，如



(a) e=999.93、1 000、1 000.07 eV 无热负载　(b) e=999.93、1 000、1 000.07 eV 有热负载

(a) e=999.93, 1 000, 1 000.07 eV without thermal power　(b) e=999.93, 1 000, 1 000.07 eV with thermal power

图 6　XOP 2.3 追迹结果

Fig. 6　Ray tracing with XOP 2.3

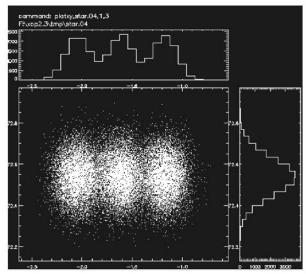


图 7　XOP 2.3 追击 $e = 999.92$ eV、1 000 eV、1 000.08 eV 加载热负载时光斑追迹图

Fig. 7　Ray tracing with XOP 2.3 $e = 999.92$、1 000、1 000.08 eV without thermal power

图 7所示，是对光子能量为 999.92、1 000 和 1 000.08 eV时的在出射狭缝出的光斑追迹图，计算得分辨率为 12 500，相比无热负载时下降了 1 800。现通过优化 C_{ff} 数提高单色器分辨率，根据图 5 所示，按照斜率误差值，用 MATLAB 对斜率误差和 C_{ff}的关系进行拟合[18]，得到：

$$\sigma_{slope} = 9.32 \times 10^{-6} C_{ff}^2 - 4.57 \times 10^{-6} C_{ff} + 5.73 + 10^{-5}. \qquad (8)$$

将斜率误差引入分辨率公式中得到优化方程：

$$R_1 \approx a \sqrt{\frac{R^2 \lambda m N (C_{ff}^2 - 1) + 8\sigma_{slope}^2}{8\sigma_{slope}^2 R^2}}, \qquad (9)$$

式中：R_1为有热负载的分辨率，a 为斜率误差对分辨率影响的权重因子。

按照优化式(9)对 C_{ff}进行优化取值，经过计算得到，优化后的 C_{ff}值为 1.84。并用 XOP 2.3 对

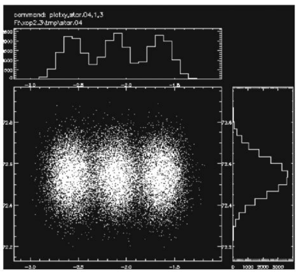


图8 热负载条件下 C_{ff}为1.84时光斑追迹结果(光子能量为999.93、1 000、1 000.07 eV)

Fig. 8 Ray tracing for e = 999.93、1 000、1 000.07 eV with thermal power when C_{ff} is 1.84

光路进行追迹,得到在 C_{ff}为1.84时,光子能量分别为999.93、1 000和1 000.07 eV,并加载热负载条件下,光斑在出射狭缝处的分辨率图,如图8所示。从图8的追迹结果可以得到,采用优化后的 C_{ff}值,单色器的分辨率的大小已经与图6(a)中无热负载时相当。结果表明:该优化方法达到了补偿单色器分辨率的目的,提供了在热负载条件下有效选择 C_{ff}的方法。

4 结 论

研究了前置平面镜热负载对变包含角平面光栅单色器分辨率的影响,运用有限元分析软件对前置平面镜进行热-结构耦合分析,并用追迹软件对光路追迹,得到聚焦常数、热负载和分辨率三者之间关系,提出了优化聚焦常数提高分辨率的方法。研究结果表明:在 SSRF 软 X 射线谱学显微光束线中,当出射光能量为1 000 eV时,将 C_{ff}由1.8优化至1.84,单色器的分辨率即可与无热负载时的相同,该方法有效地补偿前置平面镜热负载造成的分辨率降低,为平面光栅单色器考虑热负载影响时,有效选择 C_{ff}提供了理论依据。

参考文献:

[1] 渡辺诚,佐藤繁. 同步辐射科学基础[M]. 上海:上海交通大学出版社,2010.
WATANABE M,SATO S. *Introduction to Synchrotron Radiation Research*[M]. Shanghai:Shanghai-jiaotong University Press,2010. (in Chinese)

[2] 唐福元. 同步辐射的发现、特性及其应用领域的开拓[J]. 物理与工程,2004,14(3):34-39.
TANG F Y. Synchronizedradiation:Itsdiscovery, feature and exploitation[J]. *Physics and Engineering*,2004,14(3):34-39. (in Chinese)

[3] REININGER R,CASTRO A D. High resolution, large spectral range, in variable-included-angle soft X-ray monochromators using a plane VLS grating[J]. *Nuclear Instruments and methods in Physics Research A*,2005,538:760-770.

[4] ANDREAS K F. Third-generation synchrotron radiation X-ray optics[J]. *Facility. Stru*,1996,4(2):121-125.

[5] PETERSEN H,JUNG C,HELLWIG C. Review of plane grating focusing for soft X-ray monochromators[J]. *Rev. Sci. Instrum.*,1995,66(1):1-14.

[6] KANTA O,JIN H O,KOJI H. Performance of the high-resolution high-flux monochromator for bending magnet beamline BL-1C at the Photon Factory[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*,2001,467-468:573-576.

[7] 马磊,卢启鹏,彭忠琦. 谱学显微光束线光斑水平漂移分析与检测[J]. 光学 精密工程,2012,20(3):514-519.
MA L,LU Q P,PENG ZH Q. Analysis and test of light spot transversal transfer of spectromicroscpic beamline[J]. *Opt. Precision Eng.*,2012,20(3):514-519. (in Chinese)

[8] WARWICK T,CAMBIE D. A variable-included-angle plane-grating-monochromator on an undulator for spectroscopy and microscopy at the Advanced Light Source[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*,2001,1:467-468.

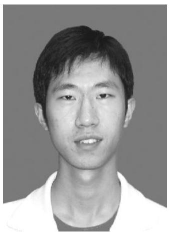
[9] 马磊. 变包含角平面光栅单色器关键技术与检测方法研究[D]. 北京:中国科学院大学,2012.
MA L. Research on the key technologies and the performance measuring for VAPGM[D]. Beijing:University of the Chinese Academy of Sciences,2012. (in Chinese)

[10] PETEERSEN H. The plane grating and elliptical mirror:A new optical configuration for monochromators[J]. *Optics Communications*,1982,40(6):402-406.

[11] 高飒飒,卢启鹏,彭忠琦,等. X射线干涉光刻偏转聚焦系统热载影响与分析[J]. 光学学报,2012,32(12):1234001

(1-7).
GAO S S,LU Q P,P ZH Q,*et al*.. Analysis of heating effect on XIL deflection focus system[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012,32(12):1234001(1-7).(in Chinese)
[12] MU B ZH,WANG ZH SH,YI SH ZH. Study of X-ray Kirkpatrick-Beaz imaging with single layer[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2009,7(5):452-454.
[13] 王纳秀. 同步辐射光束线热缓释技术研究及冷却技术的应用[D]. 上海:中国科学院上海应用物理研究所,2006.
WANG N X. Research on cooling technique of sr beamline components and application of cooling technique[D]. Shanghai:Shanghai Institute of Applied Physics,Chinese Academy of Sciences,2006.(in Chinese)
[14] CARPENTIER P,ROSSAT M,CHARRAULT P. Synchrotron monochromator heating problem, cryogenic cooling solution [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*,2001,456:163-176.
[15] 李云,邢廷文. 采用非均匀有理B样条曲面延展光学元件面形误差[J]. 光学学报,2012,32(7):0722001.
LI Y,XING T W. Surface error of optical components extended with non-uniform rational B-spline surface[J]. *Acta Optica Sinica*,2012,32(7):0722001.(in Chinese)
[16] 余景池,郭培基,孙侠菲,等. 波差与表面斜率误差评价方法的讨论[J]. 光学技术,2001,27(6):543-544.
YU J CH,GUO P J,SUN X F. Discussion of wavefront error and slope error of the surface on the assessment method[J]. *Optical Technique*,2001,27(6):543-544.(in Chinese)
[17] 王惠云,吕丽军. X射线光学系统的光线追迹[J]. 光学 精密工程,2000,8(2):110-114.
WANG H Y,LV L J. Raytracing of X-ray optical system[J]. *Opt. Precision Eng.*,2000,8(2):110-114(in Chinese)
[18] 唐家德. 基于MATLAB的非线性曲线拟合[J]. 计算机与现代化,2008,6:15-19.
TANG J D. Nonlinear curve fitting based on MATLAB[J]. *Computer and Modernization*,2008,6:15-19.(in Chinese)

作者简介:



宋　源(1988—),男,吉林白山人,硕士研究生,2011年于贵州大学获得学士学位,主要从事同步辐射单色器相关技术方面的研究。E-mail:songyuan_SHOW@126.com

卢启鹏(1964—),男,黑龙江齐齐哈尔人,研究员,博士生导师,1987年于浙江大学获得学士学位,1990年于中国科学院长春光学精密机械与物理研究所获得硕士学位,主要从事同步辐射光束线关键技术的研究。E-mail:luqipeng@126.com

彭忠琦(1957—),男,吉林榆树人,高级工程师,主要从事精密机械设计方面的研究。E-mail:pengzhongqi@126.com

龚学鹏(1982—),男,内蒙古赤峰人,副研究员,2005年、2010年于吉林大学分别获得学士、博士学位,主要从事连续多点成形设备设计、精密机械设计与工程CAE分析。E-mail:gongxuepeng120@yahoo.com.cn