

高分辨球面光栅单色器光束线的光学设计

张允武 盛六四 高 辉 张国斌

中国科学技术大学国家同步辐射实验室 合肥 230029

摘要 介绍了中国科学技术大学国家同步辐射实验室正在建设中的一条高分辨球面光栅单色器光束线的光学设计。该光束线使用具有两个包含角的球面光栅单色器，前置镜系统由水平偏转平面镜和垂直聚焦圆柱面镜组成，后置镜采用超环面镜，在设计能量范围内有高的光谱分辨本领和通量，给出了光线追迹的结果。

关键词 波荡器辐射，球面光栅单色器，光束线

中图分类号 TH744.1

中国科学技术大学国家同步辐射实验室二期工程正在建设一台波荡器，以满足原子分子物理和化学实验对高分辨高通量光源的要求。该光束线是根据这台波荡器的特性和实验用户的要求设计的。

分子和团簇的电离势大多在 8—12 eV 能量范围，要求单色器低能端工作到 7 eV 附近，但对于原子的研究来说，要求光子能量尽可能高些。然而，一台波荡器的输出的能量范围过宽，会大大增加它的结构复杂性和制造难度，而且，一个单色器跨越太宽的能量范围也不是一个好的方案。经过反复考虑，我们将波荡器和光束线的能量范围定在 7.5—124 eV。

一般来说，工作在数 eV 至 30 eV 的光束线多采用正入射光栅单色器，工作在 20 eV 至数百 eV 的光束线需采用掠入射光栅单色器。我们需要的光栅单色器跨越这两种类型光栅单色器的工作能量范围，因而给设计工作带来很大的困难。BESSY^[1]有几台超环面光栅单色器（TGM）工作在这个能量范围，但它们只能做到中等的能量分辨，不能满足我们的要求。SX700^[2]及其改进型单色器以及 F-SGM^[3]单色器都是用于同步辐射的高性能单色器，将它们的低能端扩展到我们所需的能量范围是可能的，但这种单色器的结构较复杂。Chen^[4]发明的“龙”型球面光栅单色器（SGM）是同步辐射用的主流单色器之一，它使用简单面形的光学元件和简单的光栅扫描机构获得了高的单色性能，在国外同步辐射光源上得到广泛应用^[5-8]，在北京和合肥的同步辐射光源上也分别有一台在使用^[9]。

掠入射的 SGM 光栅单色器工作在 XUV 波段有很大的优势，但要将其低能端扩展到 10 eV 以下给

设计带来许多困难。经过反复的考虑和估算后，我们决定采用具有两个包含角的 SGM 光栅单色器方案，以便将低能端扩展到我们所需的能量，且使用的光栅数和线密度适中，在整个能量范围内有高的光谱特性。为了使一个单色器具有几个包含角，通常的办法是在单色器内放置一块或几块平面反射镜，但是它们往往使单色器的分辨下降。如果将平面反射镜移到单色器外，这个缺点就可以得到克服，而且容易将光栅面朝上放置，方便安装和调试。我们的设计采用了这种结构。

1 光学系统

光束线由两个包含角的球面光栅单色器、前置光学系统和后置聚焦镜组成，如图 1 所示，分别介绍如下。

1.1 前置光学系统

从波荡器引出的辐射经过前端后首先通过固定光栏，挡去弯铁辐射和波荡器辐射的中心光锥外的辐射，只让波荡器辐射的中心光锥部分通过，然后进入称之为 K-B（Kirkpatrick-Baez）聚焦系统的前置光学系统。它的第一块反射镜 M_h 通常为圆柱面镜或球面镜，起水平聚焦作用。我们在这里把它设置为平面反射镜，原因是波荡器的发散角小，如果 M_h 有水平聚焦作用，会使光栅在弧矢面方向的辐照宽度变小，功率密度增加，降低光栅的使用寿命。 M_h 作用是在水平方向将光束偏转 8° ，一方面可以吸收一部分高能量辐射，减少下游垂直聚焦镜的热载；另一方面可以把它移出光路，将光束直接引出，用于那些无需高单色性但要高强度光的实验。镜子

的上半部和下半部分别采用不同的镀层，用于不同波段，以便获得较高的反射率。第二块反射镜为圆柱面镜，起垂直聚焦作用，将波荡器辐射聚焦到单色器的入射狭缝上，压缩比为 7:1。垂直聚焦镜有两块圆柱面镜，即用于长波段的 M_{VL} 和用于短

波段的 M_{VH} 。 M_{VL} 将波荡器光束向上偏转，经平面镜 M_L 向下偏转后聚焦到入射狭缝 S_{1L} 上； M_{VH} 将波荡器光束向下偏转，直接将光束聚焦到入射狭缝 S_{1H} 上，它们使这个单色器具有两个入射臂，其夹角为 6° 。前置光学系统的基本参数见表 1。

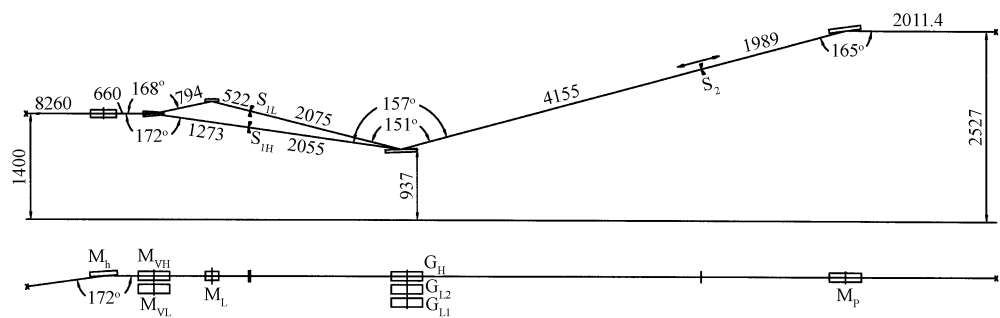


图 1 高分辨球面光栅单色器光束线的光路图

Fig.1 Optical layout of the high-resolution spherical grating monochromator beamline

表 1 光束线反射镜的基本参数

Table 1 Basic parameters of mirrors of the beamline

	M_h	M_{VL}	M_{VH}	M_L	M_p
面型 Profile	平面 Plane	圆柱面Cylindrical	圆柱面Cylindrical	平面 Plane	超环面 Toroidal
功能 Function	水平偏转 Horizontal deflection	垂直聚焦 Vertical focussing	垂直聚焦 Vertical focussing	垂直偏转 Vertical deflection	后置聚焦 Post focussing
入射臂长 Entrance arm length /mm	—	8920	8920	—	2011(V) 28094(H)
出射臂长 Exit arm length /mm	—	1316	1273	—	2011
偏转角 Deviation angle /($^\circ$)	172	168	172	154	165
曲率半径 Curvature radius /mm	∞	21937 ± 25	32005 ± 100	∞	$R=15410$ $r=490$
斜率误差 Slope error/arcsec ($\sim \lambda$)	1(t)/2(s)	0.5(t)/1(s)	0.5(t)/1(s)	0.5(t)/1(s)	2(t)/4(s)
粗糙度 Roughness /nm	1	1	0.8	1	1
基底尺寸 Blank dimension /mm	240×60×40	150×35×35	130×35×35	60×40×25	150×55×35
光学面尺寸 Used surface /mm	240×60	150×35	130×35	60×40	150×35
基底材料 Blank material	Glidcop	单晶硅 Single crystal silicon	单晶硅 Single crystal silicon	碳化硅 Siliconcarbide	熔融石英 Fused silica
镀层材料 Coating material	Ni/ Au	Au	Au	Au	Au

1.2 单色器

单色器为有两个包含角的球面光栅单色器, 两个包含角分别为 151° 和 157° 。为使单色器有较大的能量覆盖范围, 这两个包含角之差应尽量大。然而较大的包含角差会导致 M_L 和 S_{1L} 间距离变得较短, 使 M_L 的辐照功率密度增高, 结构设计变得困难。为了克服这一缺点, 需要增加垂直聚焦镜和光栅之间的距离, 这会导致光束线的长度增加, 但光束线的长度受到实验大厅空间的限制。上述两个包含角的大小是这两种因素的综合结果。

单色器使用3块球面光栅覆盖所要求的能量范围。光栅单色器的单色波长 λ 与入射角 a 、衍射角 b 以及光栅线密度 N 之间的关系由下式给出

$$Nml = \sin a + \sin b \quad (1)$$

式中 m 为光栅的衍射级次。球面光栅在子午面和弧矢面对光源都有聚焦作用。光栅在子午面的聚焦方程为

$$[(\cos^2 a)/r_1 + (\cos a)/R_g] + [(\cos^2 b)/r_2 + (\cos b)/R_g] = 0 \quad (2)$$

式中 r_1 和 r_2 分别为单色器的入射和出射臂长, R_g 为光栅的曲率半径。对于固定包含角的单色器, 我们有

$$a - b = 2q \quad (3)$$

如果 r_1 和 R_g 已经确定, (1)、(2)、(3)三个方程联立, 就可以精确求出波长 λ 随 a 、 b 和 r_2 的变化关系。

在掠入射的情况下, 球面光栅在弧矢面的聚焦作用较弱。光束线在弧矢面内的聚焦特性主要由使用的反射镜来决定, 但需考虑光栅对于弧矢面聚焦的贡献, 我们在反射镜的设计中考虑了这种影响。

在进行单色器设计时, 需要选择入射和出射臂长、掠入射角、光栅曲率半径和狭缝宽度, 使单色器有好的性能。对“龙”型球面光栅单色器来说, 其正一级衍射入射臂长 r_1 通常在 1.5—2.5 m 之间, 出射臂的最小值 $r_{2,\min}$ 与 r_1 的比值在 1.8—2.4 之间^[4]。它们由下面的公式决定

$$r_1 = 2R_g \sin q \cos a_0 / (\sin q - \sin b_0 \cos f_0) \quad (4)$$

$$r_{2,\min} = 2R_g \sin q \cos b_0 / (\sin q + \sin a_0 \cos f_0) \quad (5)$$

式中 $a_0 = f_0 + q$, $b_0 = f_0 - q$, 令 $f_0 = (\pi/2 - q)/3$, 给定 $(r_1 + r_{2,\min})$ 的值, 很容易求出 r_1 、 $r_{2,\min}$ 和 R_g 。对于有两个包含角的单色器, 两个 r_1 值与两个前置聚焦镜

的出射臂长之间应满足图1所示的三角形关系, 两个 $r_{2,\min}$ 值应尽可能接近, 以方便出射狭缝扫描机构的设计。这可通过适当调整 $(r_1 + r_{2,\min})$ 和 f_0 值来实现。

单色器的光谱分辨受到像差、入射和出射狭缝以及光栅面形斜率误差等诸多因素的影响, 它们由文献[4]给出的公式来计算。计算过程中, 反复调整单色器包含角、光栅参数、入射和出射臂长以及垂直聚焦镜的压缩比, 直到获得满意结果为止。图2给出了单色器的各种分辨率极限。图中 $\Delta\lambda_a/\lambda$, $\Delta\lambda_i/\lambda$, $\Delta\lambda_e/\lambda$ 分别代表由慧差、入射狭缝、出射狭缝、面形斜率误差决定的分辨率, $\Delta\lambda/l$ 为由它们决定的总分辨率极限。

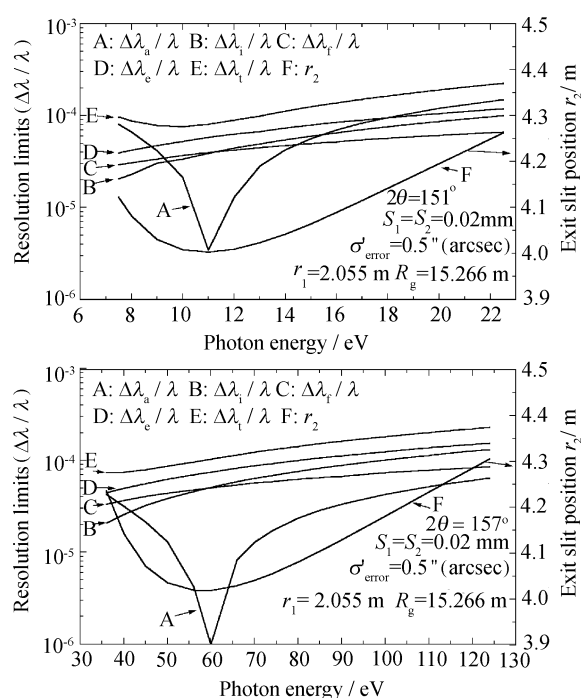


图2 单色器的各种分辨率极限和出射臂长与光子能量的关系

Fig.2 Various resolution limits of the monochromator and the exit arm length as functions of photon energy

光栅的衍射效率的计算是用 Nevier^[10]编写的 光栅效率计算软件来完成的, 由于使用了两个不同的包含角, 每块光栅都有较高的衍射效率。

表2列出了该球面光栅单色器的基本参数。表中列出的数值是根据可购买到光栅参数修改光学设计后确定的, 并通过了光线追迹的验证, 是工程采用的参数

表 2 高分辨球面光栅单色器的基本参数

Table 2 Basic parameters of the high-resolution spherical grating monochromator

	G_{L1}	G_{L2}	G_H
光栅类型 Grating type	Laminar, 1 0.65	Laminar, 1 0.6	Laminar, 1 0.7
槽深 Groove depth /nm	88.0	45.0	21.0
能量范围 Energy range /eV	7.5~22.5	15~45	36~124
线密度 Groove density / mm ⁻¹	370	740	1250
包含角 Including angle /(°)	151	151	157
入射臂长 Entrance arm length/mm	2075	2075	2055
出射臂长 Exit arm length /mm	4133±130	4133±130	4155±152
曲率半径 Curvature radius /mm	12180±15	12180±15	15266±20
基底尺寸 Blank dimension /mm	140.×30.×35	140.×30.×35	140.×30.×35
光学面尺寸 Used surface /mm	140.×30	140.×30	140.×30
面形斜率误差 Slope error /arcsec(·)	0.2(t)/0.5(s)	0.2(t)/0.5(s)	0.2(t)/0.5(s)
基底材料 Blank material	单晶硅 Single crystal silicon	单晶硅 Single crystal silicon	单晶硅 Single crystal silicon
镀层 Coating material	Au	Au	Au
能量分辨本领 Resolution power	>5000	>5000	>5000

1.3 后置镜

后置镜 M_p 为超环面镜，它将单色后的波荡器辐射聚焦于实验样品上，其光学参数见表 1。它在子午面内像的放大倍数接近于 1，慧差很小，但由于波长扫描过程中出缝的运动，后置镜在多数情况下工作在离焦状态，样品处光斑的垂直尺寸会改变，但最大不超过 0.5 mm。样品处光斑的水平尺寸主要由后置镜的弧矢面方向成像作用决定，球面光栅对弧矢面方向的聚焦也有一定的贡献，且也会随单色器波长扫描而变化，但变化幅度不大，最大尺寸不超过 1 mm。

2 光束线的光线追迹和光通量估计

用光线追迹专用程序 SHADOW^[11]对上述光路进行了计算，结果表明，这个光路方案是合理的。

我们考查了单色器在全波段范围内许多能量值的分辨能力，结果与预期的一致。图 3 给出了光子能量为 9.99933 eV、10 eV 和 10.0005 eV 时，宽度为 20 μm 的入射狭缝在出射狭缝平面上的像。由图可见，在这种情况下，慧差最小，但未考虑面形斜率误差的影响，能量分辨本领可大于 20000，是接近极限分辨的情况。

为了考查整个光束线的传输效率，计算了各反射镜的反射率、光栅的衍射效率和整个光学系统的能量分辨本领为 5000 时的几何透过率随能量的变化，它们之积乘以光源的通量后，得到照射到实验样品上的光子通量，如图 4 所示。图中三条曲线的峰值很接近，说明光束线在所设计的能量范围内都有很好的光谱特性。

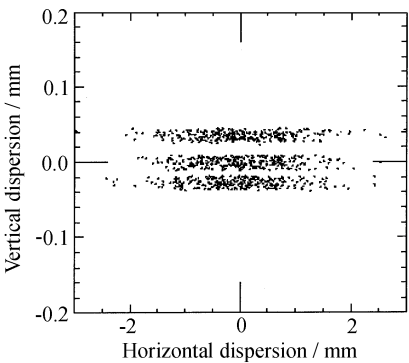


图 3 20 μm 宽入射狭缝在出射狭缝平面上的像
图中 3 条线的能量分别为 9.99933 eV、10 eV 和 10.0005 eV

Fig.3 Image pattern on the exit slit plane of 20 μm entrance slit, energy of the three lines is 9.99933 eV, 10 eV and 10.0005 eV respectively

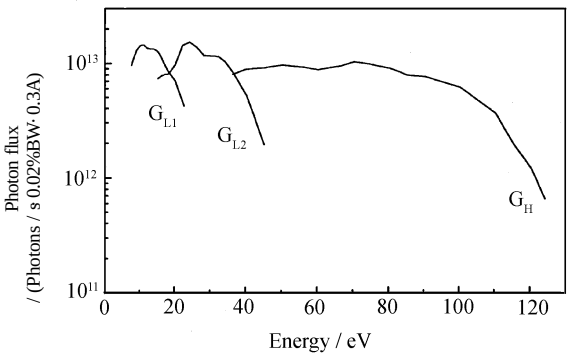


图 4 样品处的光子通量

Fig.4 Photon flux at the sample

光线追迹结果表明，样品处的光斑近似于矩形，垂直高度小于 0.5 mm，水平宽度约 1 mm，接近理论值，满足实验的要求

理论值, 满足实验的要求。

3 结论

光学计算和光线追迹的结果表明, 该光束线使用波荡器辐射, 采用 151° 和 157° 两个包含角的球面光栅单色器, 使用 370 mm^{-1} 、 740 mm^{-1} 、 1250 mm^{-1} 三块中等线密度光栅, 在 $7.5\text{--}124\text{ eV}$ 这样宽广的光子能量范围内, 可获得高的光谱分辨本领 (典型值为 5000) 和高的光子通量 ($5 \times 10^{12}/\text{s}$)。单色器前置光学系统采用 K-B 聚焦系统, 其第一块反射镜改用平面镜, 只起水平偏转和吸收部分高能辐射的作用, 没有水平聚焦作用, 有效地降低了下游光学元件特别是光栅所承受的辐照功率密度, 第二块反射镜为圆柱面镜, 只起垂直聚焦作用。样品处光斑的大小主要取决于后置镜 (超环面镜) 的聚焦作用, 球面光栅对弧矢面方向的聚焦有一定的贡献, 光斑尺寸会随光栅扫描而变化。样品处光斑的垂直尺寸最大不超过 0.5 mm , 水平尺寸最大不超过 1 mm , 满足实验要求。

致谢 在本光束线的设计过程中, Chen C T、Padmore H A、曾平忠、赵殿明和中国科学技术大学国家同步辐射实验室的同志们曾提出过许多宝贵的建

议, 为我们完成设计提供了很大的帮助, 在此一并感谢。

参考文献

- 1 BESSY Annual Report. Berlin, 1996. 15
- 2 Mythen C S, G van der Laan, Padmore H A. Rev Sci Instr, 1992, **63**: 1313—1316
- 3 Peatman W B, Bahrdr J, Eggenstein F, *et al.* Rev Sci Instr, 1995, **66**: 2801—2806
- 4 Chen C T. Nucl Instr Meth, 1987, **A256**: 595—604
- 5 Chen C T, Sette F. Rev Sci Instr, 1989, **60**: 1616—1621
- 6 Mckinney W R, Howells M R, Lauritzen T, *et al.* Nucl Instr Meth, 1990, **A291**: 221—224
- 7 Heimann P A, Warwick T, Howells M R, *et al.* Nucl Instr Meth, 1992, **A319**: 106—109
- 8 Randall K J, Feldhaus J, Erlebach W, *et al.* Rev Sci Instr, 1992, **63**: 1367—1370
- 9 SHU Deming, XU Pengsou, CAI Yong, *et al.* Proc of the International Conference on Synchrotron Radiation Applications, Hefei, 1989. 346—349
- 10 Nevier M. Marseille: Grating Efficiency Computer Code
- 11 Lai B, Cerrina F. Nucl Instr Meth, 1986, **A246**: 337—341

Optical design of a high-resolution spherical grating monochromator beamline

ZHANG Yunwu SHENG Liusi GAO Hui ZHANG Guobin

(National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029)

Abstract This paper describes the optical design of a high-resolution spherical grating monochromator beamline being constructed in National Synchrotron Radiation Laboratory at University of Science and Technology of China. The beamline consists of a spherical grating monochromator with two including angles, a pre-focusing mirror system composed of a horizontal deflection plane mirror and a vertical focusing cylindrical mirror, and a post-focusing toroidal mirror. It has high resolution power and high photon flux over the designed energy range. Results of optical ray-tracing are also presented.

Key words Undulator radiation, Spherical grating monochromator, Beamline

CLC TH744.1