

X 射线光学系统的光线追迹

王惠云¹, 吕丽军²

(1. 上海大学物理系, 上海 201800; 2. 上海大学精密机械系, 上海 201800)

摘要: 阐述了硬 X 射线光学系统的光线追迹过程, 处理的光学系统可包含任意数目的镜子、晶体及光阑, 镜子或晶体的面形可以各种各样, 它们的排列方式可为共主面或相互正交。根据劳厄衍射方程的矢量形式计算光线经对称或非对称晶体衍射后的方向。我们应用 C 语言编写了光线追迹程序, 它不仅可以得到光路中任意位置像面上光线的点列图分布, 而用可以计算晶体的摇摆曲线。最后作为例子, 我们用此程序计算了一条同步辐射 X 射线光束线系统的成像。

关键词: X 射线; 光线追迹; 晶体的摇摆曲线

中图分类号: TH703 **文献标识码:** A

1 引言

同步辐射光束线的设计一般是根据光束线的工作波长范围、性能要求和经验, 初步选择可能的单色仪、前置和后置光学系统, 并对其进行像差分析; 然后应用光线追迹对光学系统进行精确的成像模拟和性能估算; 最后综合考虑性能、造价和复杂性等因素决定光束线系统^[1,2]。由于光束线中的光学元件和机械真空系统往往都比较昂贵, 因此建立光线追迹软件对光束线系统的设计显得尤为重要。

目前, 国际上许多同步辐射中心都建立了功能强、效率高的光线追迹手段, 像 SHADOW^[3], RAY^[4] 等。在国内, 关于软 X 射线光学系统的光线追迹方面已做了比较系统的工作^[5], 但在硬 X 射线光学系统光线追迹的研究工作方面见报道的还不多。

在硬 X 射线波段, 大多采用晶体作为分光元件, 光束的准直、聚焦用反射镜。本文主要介绍由多块光学晶体、反射镜等组成的光学系统的光线追迹过程; 光学元件的面形可为平面、球面、抛物面、超环面、椭球面或各种柱面; 相邻两块光学元件的排列方式可为共主平面(成“Z”形或“U”形排列)或相互正交; 另外, 还可以在光路中任何位置加入光阑。程序不仅可以输出光线打在任何一个

光学元件表面和光路中任意位置处像面的光线坐标分布, 而且还可以输出晶体的摇摆曲线图。

2 光线追迹过程

2.1 单块光学元件的光线追迹

我们选定的坐标系如图 1 所示。X₀Y₀Z₀ 是源点坐标系。XYZ 是光学元件坐标系, 其中 Z 轴垂直于光学元件表面, 原点 O 位于光学元件的顶点, XY 过 O 点并垂直于 Z 轴。XZ 是像坐标平面, 它垂直于主光线。

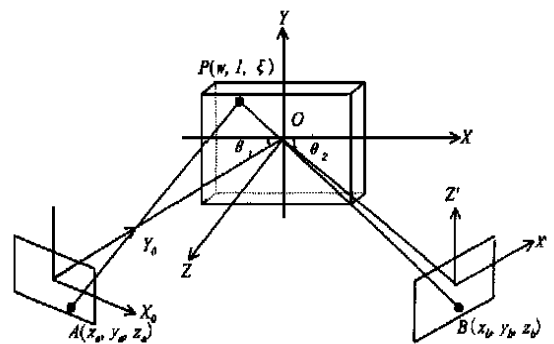


Fig. 1 X₀Y₀Z₀, XYZ and XZ are coordinate systems on the source, optical element and image plane, respectively

我们假设光源是面光源,光源上的任意一点 $A(x_0, y_0, z_0)$, 由以下公式转换到光学元件坐标系中为 (x_a, y_a, z_a) ,

$$\begin{pmatrix} x_a \\ y_a \\ z_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta_1 & \cos\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \cos\theta_1 & -\sin\theta_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 - r_0 \\ z_0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

其中 r_0 为光源中心到光学元件中心的距离, θ_1, θ_2 分别为主光线的掠入射角和掠出射角。 $P(w, l, \xi)$ 是由 A 发出的光线与光学元件表面的交点, 光线经光学元件反射或衍射后, 到达像面上的 B 点。 B 点在 XYZ 坐标系中的坐标为 (x_b, y_b, z_b) 。 在 XYZ 坐标系中, 入射光线和出射光线的方向余弦分别为 (L, M, N) 和 (L', M', N') , P 与 A, B 间的距离用 $\langle AP \rangle, \langle PB \rangle$ 表示。 很显然有如下关系:

$$\langle AP \rangle = \sqrt{(w - x_a)^2 + (l - y_a)^2 + (\xi - z_a)^2} \quad (2)$$

$$L = \frac{w - x_a}{\langle AP \rangle} \quad M = \frac{l - y_a}{\langle AP \rangle} \quad N = \frac{\xi - z_a}{\langle AP \rangle} \quad (3)$$

$$\langle PB \rangle = \sqrt{(x_b - w)^2 + (y_b - l)^2 + (z_b - \xi)^2} \quad (4)$$

$$L' = \frac{x_b - w}{\langle PB \rangle} \quad M' = \frac{y_b - l}{\langle PB \rangle} \quad N' = \frac{z_b - \xi}{\langle PB \rangle} \quad (5)$$

为了求像点坐标 $B(x_b, y_b, z_b)$, 必须首先求出出射光线的方向余弦 (L', M', N') 。 在下一小节中, 我们将详细介绍如何应用劳厄衍射方程的矢量形式求光线通过晶体后的衍射方向余弦 (L', M', N') 。 然后, 把 $x_b = w + L' \langle PB \rangle, z_b = \xi + N' \langle PB \rangle$ 代入像面方程,

$$x \cos\theta_2 + z \sin\theta_2 = r \quad (6)$$

得到

$$\langle PB \rangle = \frac{r - w \cos\theta_2 - \xi \sin\theta_2}{L' \cos\theta_2 + N' \sin\theta_2} \quad (7)$$

再代入方程(5), 我们就可求得 (x_b, y_b, z_b) 。 用下面公式把上述像点 B 的坐标 (x_b, y_b, z_b) 转换到像面坐标系 XZ 中:

$$X = (x_b - r_0 \cos\theta_2) / \sin\theta_2, Z = y_b \quad (8)$$

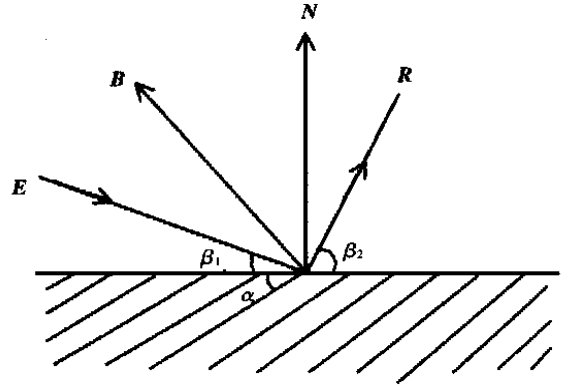


Fig. 2 E and R are the unit vectors of the incident and diffracted rays on an asymmetrically cut crystal, N and B are the ones of the normal of optical surface and Bragg plane, respectively

2.2 应用劳厄方程求晶体衍射光线的方向

下面我们介绍如何应用劳厄衍射方程的矢量形式求光线经过晶体衍射后的方向余弦。 如图 2 所示, E, R 分别为入射光线、衍射光线的单位矢量, N, B 为晶体表面法线、晶面法线的单位矢量。 β_1, β_2 分别为入射光线、衍射光线与晶体表面的夹角, α 为晶面和晶体表面的夹角。 E, R, N 用矢量表示就是 $E = Li + Mj + Nk, R = L' i + M' j + N' k, N = c_1 i + c_2 j + c_3 k$ 。 (L, M, N) 和 (L', M', N') 如公式(3), (5)所定义; (c_1, c_2, c_3) 可由光学元件的面形方程和 P 点坐标求得; 应用 $|E \cdot N| = \sin\beta_1$ 确定入射角 β_1 。 由图 2 得到如下关系:

$$R \cdot N = \sin\beta_2 \quad (9)$$

$$(R \times E) \cdot N = 0 \quad (10)$$

$$L'^2 + M'^2 + N'^2 = 1 \quad (11)$$

方程(10)表示入射光线、衍射光线和法线共面。

光线通过晶体衍射后的极大值方向应满足劳厄方程

$$\frac{2\pi}{\lambda} R = \frac{2\pi}{\lambda} E + \frac{2\pi}{d} B \quad (12)$$

上述劳厄方程在水平方向的分量形式为

$$\cos\beta_2 - \cos\beta_1 = -\frac{\lambda}{d} \cdot \sin\alpha^{[6]} \quad (13)$$

因此, 如果已知光线的入射角、波长及晶体参数, 便可以求出衍射光线的方向角 β_2 。 (9), (10), (11)可写成

$$L' c_1 + M' c_2 + N' c_3 = \sin\beta_2 \quad (14)$$

$$(M' N' - N' M) c_1 + (N' L' - L' N) c_2 +$$

$$(L' M' - M' L) c_3 = 0 \quad (15)$$

$$L'^2 + M'^2 + N'^2 = 1 \quad (16)$$

由此方程组可求出 (L', M', N') 。

在方程(13)中,当 $\alpha = 0$ 时,晶体的衍射角等于入射角。对于反射镜, $\beta_2 = \beta_1$,即反射角等于入射角;然后也是根据(14) - (16) 求出(L, M, N)。

2.3 多块光学元件的光线追迹

以上我们计算了第一块光学元件的像面坐标。为了计算第二块元件的像面上的光线坐标,我们把第一块光学元件的像面作为第二块光学元件的源面,然后按照与第一块光学元件相同的方法便可求得,但需要先求出光线打在第二块光学元件表面上的交点坐标。由 $P(x_{p2}, y_{p2}, z_{p2}), B(x_{b2}, y_{b2}, z_{b2})$ 两点坐标(在第二块光学元件坐标系中的坐标)写出PB的直线方程:

$$\begin{cases} x = x_{b2} + \frac{z - z_{b2}}{z_{p2} - z_{b2}} \cdot (x_{p2} - x_{b2}) \\ y = y_{b2} + \frac{z - z_{b2}}{z_{p2} - z_{b2}} \cdot (y_{p2} - y_{b2}) \end{cases} \quad (17)$$

如图3所示,先令方程组(17)中的 $z = 0$,得直线PB与第二块光学元件的XY平面的交点(x, y)。把它代入第二块光学元件的面形方程 $z = f(x, y)$ 中求得 z 值,然后把这个 z 值代入方程(17)求得一新的(x, y)。再把它代入第二块光学元件面

形方程 $z = f(x, y)$ 中求新的 z 值。如此循环,直到相邻两个 z 的差值小于某一设定的数值,这时的(x, y, z)就作为PB与光学元件表面的交点坐标。

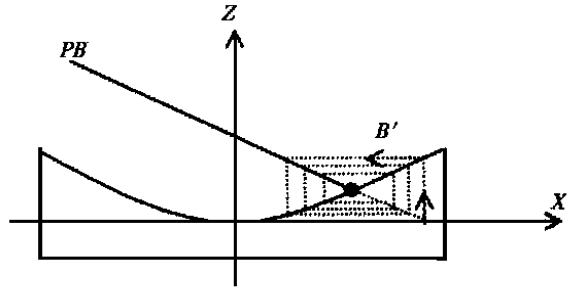


Fig.3 The ray PB intersects with optical element at B

在上面求PB的直线方程时,我们必须将 P, B 坐标从第一块光学元件坐标系转换到第二块光学元件坐标系中。下面针对两块元件的几种相对位置,具体分析两个光学元件坐标系间的坐标转换。设主光线对第一个光学元件的掠出射角为 θ_2 ,对第二块光学元件掠入射角为 θ , Σ_1 为第一块元件的像面。 r_1 是第一块光学元件中心到 Σ_1 的距离, r_2 是 Σ_1 到第二块光学元件中心的距离。

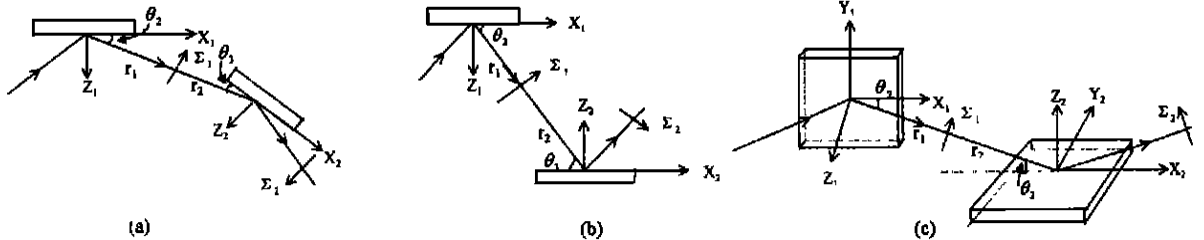


Fig.4 The two optical elements are in (a) "U" arrangement, (b) "Z" arrangement, (c) orthogonal arrangement

两块光学元件坐标系间的坐标转换公式为(18), (19), (20), 它们分别对应于这两块光学元

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_3 + \theta) & 0 & \sin(\theta_3 + \theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta_3 + \theta) & 0 & \cos(\theta_3 + \theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - (r_1 + r_2) \cos\theta \\ y_1 \\ z_1 - (r_1 + r_2) \sin\theta \end{pmatrix} \quad (18)$$

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_2 - \theta) & 0 & \sin(\theta_2 - \theta) \\ 0 & -1 & 0 \\ \sin(\theta_2 - \theta) & 0 & -\cos(\theta_2 - \theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - (r_1 + r_2) \cos\theta \\ y_1 \\ z_1 - (r_1 + r_2) \sin\theta \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$\begin{pmatrix} x_2 + (r_1 + r_2) \cos\theta_3 \\ y_2 \\ z_2 - (r_1 + r_2) \sin\theta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_2 \cos\theta_3 & \sin\theta_3 & \sin\theta_2 \cos\theta_3 \\ \sin\theta_2 & 0 & -\cos\theta_2 \\ -\sin\theta_3 \cos\theta_2 & \cos\theta_3 & -\sin\theta_3 \sin\theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

3 应用实例

3.1 像面上的光线点列图

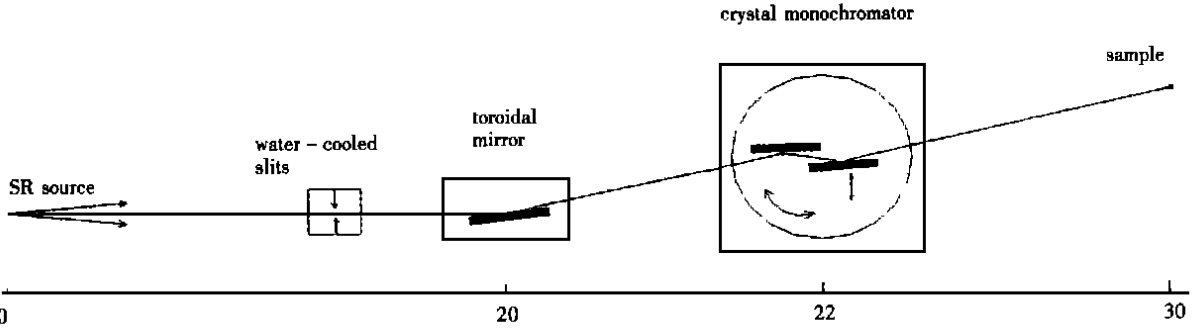


Fig. 5 The optical design of the double crystal monochromator

我们按照上述过程应用 C 语言编写了 X 射线光学系统的光线追迹程序。图 5 为一同步辐射 X 射线光束线系统的光路图,它主要由一前置超环面镜和平面双晶单色仪组成。作为应用的例子,我们将用这个程序来分析光束线中超环面镜的几何像差对样品处光斑大小的影响。假定光源为点光源,光源发出的光束经前端的四刀狭缝限制后,光束线的垂直和水平接收分别为 0.15mrad 和 1.5mrad 。超环面镜距光源 20m ,与样品相距 10m 。超环面镜的子午和弧矢半径分别为 3819.7m , 46.5mm ,掠入射角为 0.2° 。单色仪的晶体是 $\text{Si}(1, 1, 1)$, 波长调谐范围 $0.6 \sim 1.5\text{\AA}$ 。假定光学元件的尺寸足够大,不会造成光线的损失。

我们把光学系统参量输入程序,得到样品处光线的坐标数据文件。图 6 就是样品处光线的点列图分布。在色散方向 (X) 上像的加宽主要是超环面镜的像散彗差造成。

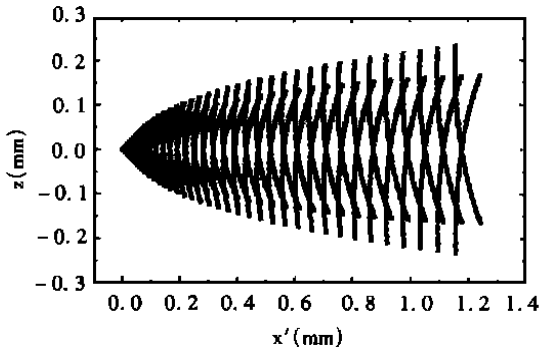


Fig. 6 The spot diagram at the image. X, Z are horizontal and vertical coordinate, respectively

3.2 晶体的摇摆曲线图

为了计算单色仪的光谱分辨率,我们的程序

包含了计算晶体的摇摆曲线分布 (rocking-curve) 的功能。光线经过中心对称的理想厚晶体的 Bragg 衍射后,其反射率表达式为^[7]:

$$R = L - \frac{1}{L^2 - 1} \quad (21)$$

其中

$$L = \frac{1}{1 + k^2} \left\{ W^2 + g^2 + \left[(W^2 - g^2 - 1 + k^2)^2 + 4(gW - k)^2 \right]^{1/2} \right\},$$

$$g = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{b} + \frac{1}{b} \right\} \frac{\Psi_{0i}}{C |\Psi_{hr}|}$$

$$W = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{b} + \frac{1}{b} \right\} \frac{\Psi_{0r}}{C |\Psi_{hr}|}$$

$$+ \frac{1}{b} \frac{\sin 2\theta_B}{C |\Psi_{hr}|} (\theta - \theta_B),$$

$$k = \frac{\Psi_{hi}}{\Psi_{hr}}$$

$$\Psi_{h(r,i)} = \frac{re\lambda^2}{\pi V} F_{h(r,i)} e^{-M}$$

$$F_{hr} = \sum_j (f_h^0 + \Delta f) \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j))$$

$$F_{hi} = \sum_j \Delta f'' \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j))$$

在上述表达式中, C 为偏振因子,当单色仪采用垂直色散时 $C = 1$; 我们取温度因子 $e^{-M} = 1$; Ψ_{hi} , Ψ_{hr} 分别是磁化率 $\Psi_{h(r,i)}$ 的虚部和实部,其中 $re = e^2/mc^2$, V 是晶胞体积; 原子散射因子 $f_h = f_h^0 + \Delta f + i\Delta f''$, 其中 Δf 和 $\Delta f''$ 是反常色散修正的实部和虚部; 由于 $\text{Si}(1, 1, 1)$ 晶体为金刚石型结构的晶体, $h = k = l = 1$, 所以 $F_{hr} = 4(f_h^0 + \Delta f)(1 + i)^{[8]}$; $b = \sin(\theta_B - \alpha) / \sin(\theta_B + \alpha)$ 定义为反对称因子; θ 为光线掠入射角, θ_B 为 Bragg 角。

仍以图 5 所示的光束线系统为例按照上述公

式计算晶体的摇摆曲线。若工作波长为 1.54\AA ，根据 Bragg 衍射方程可计算出 θ_b ；原子散射因子是来自参考文献[9]；晶面和晶体表面平行， $\alpha=0$ 。应用我们的追迹程序可得到光线通过第一块和第二块晶体后的摇摆曲线，如图7中的实线 R_1 和虚线 R_2 所示。

应用相同的参数运行 SHADOW，得到的像的点列图和晶体的摇摆曲线与图6和图7完全相同。

参考文献:

- [1] Paul D F, Cooper M J, Stirling W G. Design of an X-ray beamline on a bending magnet at the ESRF for magnetic and high resolution diffraction[J]. Rev. Sci. Instrum., 1995, 66: 1741- 1744.
- [2] Padmore H A, Eamest T, et al. A beamline for macromolecular crystallography at the Advanced Light Source[J]. Rev. Sci. Instrum., 1995, 66: 1738- 1740.
- [3] Lai B, Cerrina F. SHADOW: A Synchrotron Radiation Ray Tracing Program[J]. Nucl. Instrum. and Meth., 1986, A246: 337- 341.
- [4] Hubbard David J, Pantos Emmanuel. Raytracing facilities at DARESBURY laboratory[J]. Nuclear Instruments and Methods, 1983, 208: 319- 326.
- [5] Lu Lijun. Raytracing facility for soft X-ray and vacuum ultraviolet monochromators at NSRL[J]. Rev. Sci. Instrum., 1994, 65: 3661- 3666.
- [6] del Rlo M Sanchez, Cerrina F. Asymmetrically cut crystals for synchrotron radiation monochromators[J]. Rev. Sci. Instrum., 1992, 63: 936- 940.
- [7] Matsushita T, Hashizume H. Handbook on Synchrotron Radiation[J]. 1983, 1: 269- 273.
- [8] 周上祺等. X 射线衍射分析[M]. 重庆: 重庆大学出版社, 1991.
- [9] Birmingham, International table for X-ray crystallography[J]. 1990, 3: 72- 150.

Raytracing of X-ray optical system

WANG Hui-yun¹, Lü Li-Jun²

(1. Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 201800, China;

2. Department of Precision Instrument, Shanghai University, Shanghai 201800, China)

Abstract: The raytracing process of an X-ray optical system is described, which may includes any number of mirrors and/or crystals with various figure shapes as well as aperture. The arrangement of optical elements may be coplanar or orthogonal to each other. Diffraction direction of a ray passing a crystal for symmetrical or asymmetrical reflection is calculated from the vector form of Laue diffraction equation. The raytracing program is written in C language, with which not only the ray spot diagram at any position in the optical system can be obtained but also the rocking-curve of a crystal can be calculated. Finally, as an example, the application of the program in calculating the imaging of an X-ray synchrotron-radiation beamline system is demonstrated.

Key words: X-ray; raytracing; crystal rocking-curve

作者简介: 王惠云(1976-), 女, 山西临汾市人, 在读研究生, 主要从事同步辐射光束线设计方面的工作。

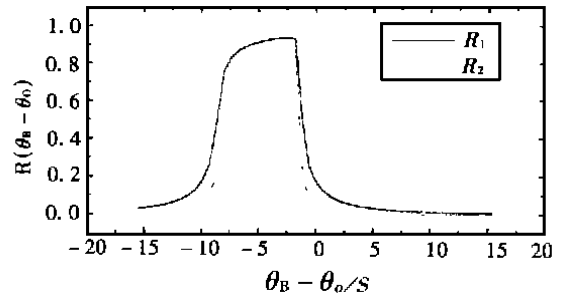


Fig. 7 The rocking curves of crystals. R_1 is for the first crystal, R_2 is for the second crystal