

# X 射线衍射和散射光束线环面聚焦镜的面形精度与像差分析

黄志刚, 董晓浩, 高 飞, 徐朝银

(中国科学技术大学 国家同步辐射实验室, 安徽 合肥 230029)

**摘要:** 介绍了用于 NSRL 的 X 射线衍射和散射光束线中环面聚焦镜的成像原理和基本结构, 分析计算了各种像差和面形精度对成像质量的影响, 重点描述了镜子因受力弯曲在子午方向的曲率变化与理论值的误差以及反射表面受同步辐射光照射而产生的热载变形, 进而求得实验样品上束斑成像的高度。最后用 CCD 探测实际光斑的尺寸, 结果表明: 理论计算与实测数据非常吻合。

**关键词:** 环面聚焦镜; 面形误差; 像差; 同步辐射

**中图分类号:** O432. 1 **文献标识码:** A

## Slope error and aberration analysis for XRD X beamline toroidal focusing mirror

HUANG Zhi-gang, DONG Xiao-hao, GAO Fei, XU Chao-yin

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

**Abstract:** A long cylindrical mirror bent into a toroidal shape in a special mechanism is usually used to focus the synchrotron radiations in both horizontal and vertical directions of X-ray beamline. The imaging principle and structural parameters of a XRD X beamline toroidal focusing mirror for NSRL use are discussed, the effect of aberrations and slope errors on the imaging quality is analyzed, the variation of curvature in meridional direction due to mirror bending, the error for theoretical value, and the thermal distortion resulting from the incident beam are discussed in detail. The actual measurements made with Marcam CCD camera showed that the theoretical calculations are in very good agreement with the actual measurements.

**Key words:** toroidal focusing mirror; slope error; aberrations; synchrotron radiation

## 1 引言

环面聚焦镜是国家同步辐射实验室 2 期工程项目 X 射线衍射和散射光束线上的关键部件, 其作用是以 7/9. 3 的缩放比把储存环超导扭摆磁

铁 (wiggler) 引出的一束水平接收角 3 mrad、垂直发射角 0. 1 mrad 的同步辐射光聚焦成  $0. 5 \times 4 \text{ mm}^2$  的光斑, 通过双晶单色仪分光后照射到实验样品上。工作状态下的环面聚焦镜面形精度直接影响 X 射线在实验样品上的束斑质量。

## 2 成像原理和结构参数

图 1 是光束线的成像原理图。一束水平接收角  $\theta_h = 3 \text{ mrad}$ 、垂直接收角  $\theta_v = 0.1 \text{ mrad}$  的同步光以掠入射角  $i = 5 \text{ mrad}$  照在距光源  $p = 9.3 \text{ m}$  的环面镜上, 经水平和垂直 2 个方向聚焦, 把光束汇聚到距镜子  $q = 7 \text{ m}$  的试验样品上。光源和像斑各位于椭球的 2 个焦点上, 若要获得与光源完全匹配的像斑, 则聚焦镜表面形状必须与所在位置的椭球面一样, 但因制造困难, 用于光束线上大面积的聚焦镜常以环面代替椭球面。聚焦镜是一块熔融石英作衬底表面镀铂的柱面镜, 在 4 点压弯机构作用下的反射面形成类似轮胎内表面的环面如图 2 所示。镜子在光束方向长  $720 \text{ mm}$ , 宽  $60 \text{ mm}$ , 厚  $40 \text{ mm}$ 。光束线传递的光谱能量范围  $4.1 \sim 12.4 \text{ KeV}$ , 铂在光谱高能端产生全反射时的临界角  $\theta_c = 6.8 \text{ mrad}$ , 取掠入射角  $i = 5 \text{ mrad}$ 。镜子结构参数由光程函数导出<sup>[1]</sup>:

弧矢曲率半径:

$$R_s = 2 \sin i \frac{pq}{p+q} = 40 \text{ mm}$$

子午曲率半径:

$$R_m = \frac{2pq}{(p+q) \sin i} = 1597 \text{ m}$$

光在镜面上的照射长度:

$$l = \frac{2ip(p+q)}{2q(8\frac{2}{i} + \frac{2}{h})} + \frac{vD}{i} = 650 \text{ mm}$$

光在镜面上的照射宽度:

$$w = hD = 28 \text{ mm}$$

铂镀层厚度:  $t = 50 \text{ nm}$

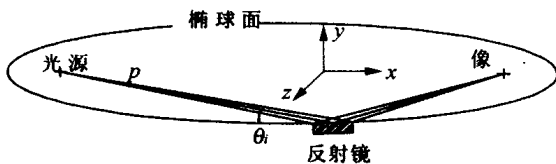


图 1 环面镜的成像原理

Fig. 1 Imaging principle of the toroidal mirror

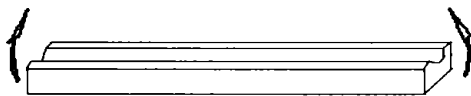


图 2 镜子立体示意图

Fig. 2 Schematic of the mirror profile

## 3 像差分析

像差, 顾名思义是物与像之间的差异。选择成像模式, 给出合理参数, 尽量减小像差影响是光学系统优化设计所追求的目的之一。像差主要包含 5 种: 球差、像散、彗形像差、像弯曲和像倾斜。前 3 种是在像周围形成晕环, 放大聚焦光斑的尺寸, 后两种是使像产生弯曲和倾斜, 改变了像的形状和位置。本环面镜的设计主要考虑球差、像散、彗形像差对聚焦像斑尺寸的影响。

(1) 球差: 由于用环面代替了椭球面, 镜面上任一点到椭球两个焦点的距离之和  $(p+q)$  不是常数, 环面镜的弧矢曲率半径和子午曲率半径也仅仅是椭球面几何中心  $(p=9.3 \text{ m}, q=7 \text{ m})$  一点处的曲率半径, 显然在光源一侧环面镜的弧矢曲率半径和子午曲率半径小于椭球面, 而在成像一侧则弧矢曲率半径和子午曲率半径大于椭球面。这种曲面误差在成像中产生了球面像差。由于子午曲率半径远大于弧矢曲率半径, 因此球面误差主要敏感于子午面上。环面与椭球面之间在子午面上的最大曲面误差<sup>[4]</sup>:

$$\max_{\text{ellipse-sphere}} = \frac{3l^2 i (M^2 - 1)}{8p^2 M^2} = 4 \mu\text{rad}$$

(2) 像散: 除了选用 2 块相互垂直放置的柱面镜作为水平和垂直两个方向聚焦的模式 (称 KB 聚焦模式) 以满足这一条件来完全消除像散外, 在单块环面镜的使用中克服像散的唯一条件是  $R_s/R_m = (\sin i)^2$ 。上述环面由光程函数推导的  $R_s$  和  $R_m$  自然满足这一点, 因此像散影响甚小不必考虑。

(3) 彗形像差: 由于聚焦面上各点的缩放比  $M$  不同, 导致了离轴聚焦的降级, 尤其在光源大, 掠入射角小时, 其影响不可忽视。在本环面镜的设计中, 光束在整个镜面照射长度的缩放比的变化为<sup>[4]</sup>:

$$\text{coma} = (M+1) \frac{l}{4p} = 0.031$$

从上面的球面像差和彗形像差公式看出, 环面镜像差的大小取决于光束在镜面上的照射长度  $l$ 、掠入射角  $i$ 、镜子到光源距离  $p$  和缩放比  $M$ 。在前 3 项结构参数确定的情况下, 通过改变缩放比  $M$  来改变像差在成像中的成分。

### 4 面形误差分析

面形误差 (slope errors rms) 是反射表面上的起伏波纹与理想平滑面之间的误差, 由图 3 中斜率表示。\$S\_i\$ 为入射光束, \$S\_r\$ 为理想反射光束, \$S\_i = S\_r\$; \$S\_p\$ 为实际反射光束, \$S\_p = S\_r + 2 \Delta\$; \$i\$ 为掠入射角, \$r\$ 为掠反射角, \$i = r\$。面形误差的存在放大了聚焦光斑, 影响成像效果。本环面镜产生面形误差有 3 个方面:

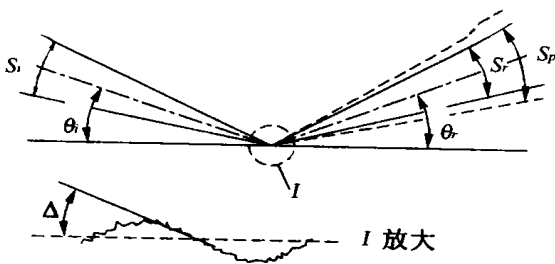


图 3 反射表面的面形误差对成像效果的影响  
Fig. 3 Influence of the slope error on optical focus

(1) 面形加工时留下的宏观波纹, 称静态面形误差 shaping。根据目前镜面加工技术提出环面镜在子午面上的静态面形误差 shaping < 5 μrad。

(2) 压弯和自重引起的动态面形误差。环面镜在子午和弧矢两个相互垂直截面上的形状均是一段圆弧, 弧矢面上的圆弧 \$R\_s = 40\$ mm, 直接加工成形, 子午面上的 \$R\_m = 1597\$ m, 是在压弯机构作用下强迫弯曲而成。夹持镜子两端的滚子上下压力点相距 \$a = 30\$ mm。固定滚子的 U 形座绕柔性轴转动时, 在镜子两端施加一对力偶 \$P\$。固定滚子的 U 形座绕柔性转轴转动, 从而使镜子弯曲。4 对滚子都能自由转动, 避免压弯过程中产生纵向力。镜子除两端受到力偶以外, 还存在沿纵向均匀分布的重力载荷 \$q\$, 如图 4 所示。为了减少重力引起的面形误差, 镜子下面用平衡杠杆附加一对载荷 \$P\$, 优化计算的结果为: 两载荷之间的距离为 \$L/\sqrt{3}\$ 时即 \$b = 152\$ mm 时, 重力引起的面形误差最小。应用材料力学中梁的变形理论, 写出镜子沿纵向各点挠曲线近似微分方程, 求解得出转角方程:

$$\begin{aligned}
 1 &= \left( \frac{1}{2} P x^2 - \frac{1}{6} q x^3 - 4.076 0 \right) / 18 865 \\
 &\quad (0 \quad x \quad a) \\
 2 &= \left( P a x - \frac{1}{6} q x^3 - 4.2532 \right) / 18 865 \\
 &\quad (a \quad x \quad b) \\
 3 &= \left[ P a x - \frac{1}{6} q x^3 + \frac{1}{2} P (x - b)^2 - \right. \\
 &\quad \left. 4.253 2 \right] / 18 865 \\
 &\quad (b \quad x \quad L/2)
 \end{aligned}$$

计算镜面沿纵向各点的转角, 将其与理论圆弧比较, 其偏差视为压弯和自重引起的动态面形

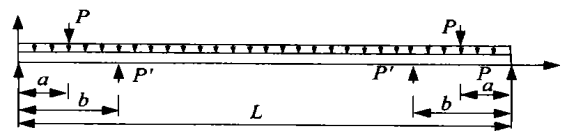


图 4 镜子沿纵向受力分布: \$P = 393.8\$ N, \$P' = 17\$ N, \$q = 47.6\$ N/m, \$a = 0.03\$ m, \$b = 0.152\$ m, \$L = 0.72\$ m

Fig. 4 Forces acting on the mirror: \$P = 393.8\$ N, \$P' = 17\$ N, \$q = 47.6\$ N/m, \$a = 0.03\$ m, \$b = 0.152\$ m, \$L = 0.72\$ m

误差, 计算结果如图 5 所示 (因对称图中长度方向取 \$L/2\$)。显然在镜子的两端因夹持产生的误差很大, 设计中不计算在有效范围内。因此, 镜子在照射长度内 \$L = 650\$ mm 的最大动态面形误差 bending = 2.408 μrad, 而镜子的实际长度取为 \$L = 720\$ mm。

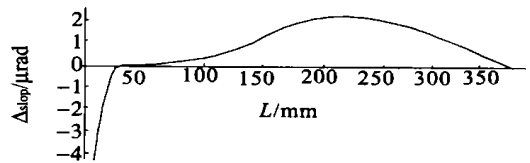


图 5 镜面因弯矩和重力产生的面形误差沿长度方向的变化  
Fig. 5 Slope error of mirror surface in length direction caused by bending and gravity

(3) 镜面因热载变形产生了热态面形误差。经典计算温度场的方法是建立在一维或二维的数学模型上, 把热变形引起的位移场分解成弯曲 (bending) 和凸起 (bump)。以下就是用这种分析方法算出本环面镜的热载变形, 首先分析照射表

面上的温度梯度。由于光源峰值功率  $2.8 \text{ W/mrad}^2$ , 掠入射角  $5 \text{ mrad}$ , 镜面上功率辐照密度很低, 不会产生相当的表面温度梯度而使镜面局部隆起, 因此这一因素可以忽略。其次是横向截面上因镜子无冷却系统, 直接照射表面和背面之间存在温度差, 受热后自上而下产生不同的线膨胀, 使镜子沿纵向弯曲。弯曲面形由下列近似公式计算<sup>[4]</sup>:

$$\text{thermal} = - \int_0^x \frac{1}{h_z} e^{-t/2} dt$$

$$0 = - \frac{P_{abs}}{w \sqrt{2}}$$

台劳展开近似再积分得到公式:

$$\text{thermal} = \frac{C}{2} \frac{P_{abs}}{w} \frac{1}{h_z} x - \frac{1}{3} \frac{1}{h_z} x^3$$

其中镜子无冷却时,  $C = 1$

$$= 4.35 \times 10^{-8} \text{ m/W}$$

为热膨胀系数,  $\alpha$  为热传导率

镜面辐照功率  $P_{abs} = 0.84 \text{ W}$ , 镜面照射宽度  $w = 28 \text{ mm}$ , 光束垂直方向的高度  $h_z = 0.93 \text{ mm}$ ,  $i$  为镜子的掠入射角。

把各项参数代入,  $x$  取镜子长度的一半  $360 \text{ mm}$ , 得到最大面形误差为  $1.75 \mu\text{rad}$ 。若要得到更精确的结果必须应用弹性力学的概念, 在三维数学模型基础上, 给出在已知温度场条件下位移场和力学边界条件的关系。考虑到镜子的几何形状, 外部载荷的不规则性, 求其解析解较困难。为了验证这一计算结果, 使用目前常用的分析软件 (ANSYS 软件) 进行求解。根据本环面镜所用材料和工作状态, 给出的边界条件为: 镜子基体和反射表面的黑度分别为  $0.6$  和  $0.058$ , 当掠入射角  $i = 5 \text{ mrad}$ , 取镜子的功率吸收效率为  $0.5$ 。同步辐射功率密度水平方向为均匀分布, 垂直方向为高斯分布, 但镜子对光束在垂直方向的接收角仅为  $0.1 \text{ mrad}$ , 视为均匀分布, 不会影响到结果的确信度, 所以镜子的热流边界条件为在镜子表面  $650 \text{ mm} \times 28 \text{ mm}$  的面积上施加热流密度为  $10 \text{ W/m}^2$  的热流。镜子处在真空环境下, 与支撑均为点或线接触, 因此仅考虑辐射散热条件。这样得出结果如图 6 和图 7。最大的面形误差为  $\text{thermal} = 4.37 \mu\text{rad}$ 。显然结果大于上面传统模式计算的

结果, 所以取  $\text{thermal} = 4.37 \mu\text{rad}$  为最终值。综合上面的分析, 取 3 部分面形误差的卷积为本环面镜综合面形误差:

$$\text{slope} = \sqrt{\text{shaping}^2 + \text{bending}^2 + \text{thermal}^2} = 7.06 \mu\text{rad}$$

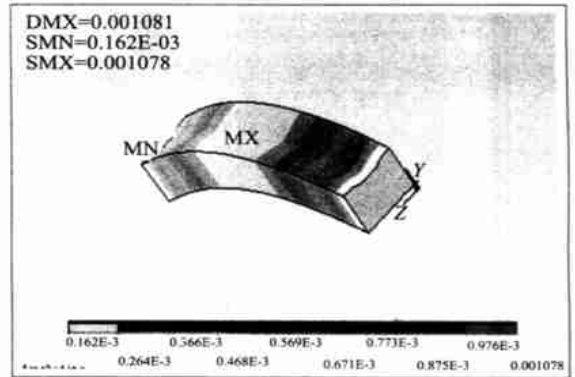


图 6 镜子受 X 射线辐照下的变形情况

Fig. 6 Deflection of mirror caused by X-ray radiation

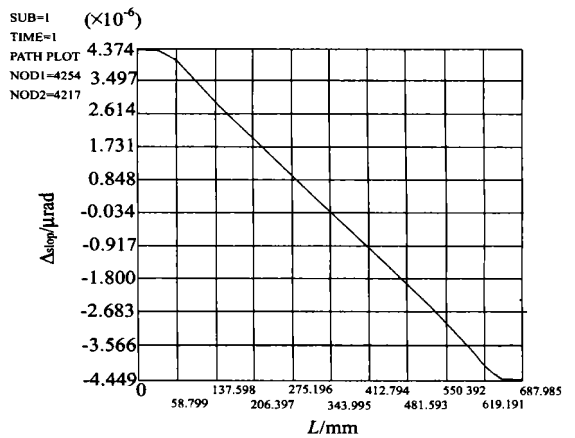


图 7 镜子受热后表面面形误差随长度的分布

Fig. 7 Slope error of mirror surface in length direction caused by radiation

## 5 像斑高度

受像差和面形误差影响, 光源的成像无疑放大了, 这种放大最明显的是在垂直方向。根据 Jean. Susini 等人推导的垂直成像公式计算结果为<sup>[4]</sup>:

$$F_y = \left[ \left( \frac{3}{16} l^2 \frac{i}{p} \frac{1+M^2}{M} + S_y M + S_y (M+1) \frac{l}{4p} \right)^2 + (2 \times 3 \text{ slope } MP)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = 0.50 \text{ mm}$$

同步辐射在横向截面的垂直方向呈高斯分布。光源参数  $v = 0.1609 \text{ mm}$ , 因此式中  $S_y =$

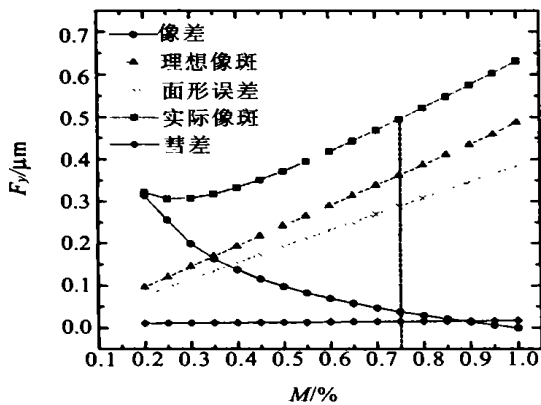


图 8 环面镜像差和面形误差对光源成像高度的影响  
( $P = 9.3 \text{ m}$ ,  $i = 5 \mu\text{rad}$ )

Fig. 8 Contribution from aberration, coma and slope error on the vertical spot size ( $P = 9.3 \text{ mm}$ ,  $i = 5 \mu\text{rad}$ )



图 9 光束线出口在 CCD 探测器上成像的单体光斑

Fig. 9 Monochromatic spot detected by the CCD camera at beamline exit

$3 v = 0.4827 \text{ mm}$ , 其中括号内第 1 项是球差, 第 2 项是理想聚焦光斑, 第 3 项是彗差, 第 4 项是面形误差, 它们对成像的贡献由图 8 中各曲线表示。在缩放比  $M = 7/9.3$  时, 成像高度  $F_y = 0.50 \text{ mm}$ , 图 9 是从光束线出口引出的单色 X 射线在 MarCam CCD Camera (专用于 X 射线准直) 摄下的实际成像光斑, 按 CCD 标定的比例测得中心光斑为  $0.5 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$ , 与计算结果非常吻合。

## 6 结 论

合肥 X 射线衍射光束线取源 0.8 GeV 真空紫外环的插入件超导扭摆磁铁, 经环面镜聚焦、晶体单色仪分光, 提供给用户开展生物大分子晶体结构分析, 高分辨率 X 射线粉末和单晶衍射、以及多层膜结构的 X 射线衍射和散射的研究。作为光束线的一个重要部件, 环面聚焦镜已通过总体性能测试, 在能量 4.1 ~ 12.4 KeV 内焦斑为  $0.5 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$ , 光子通量均在  $5 \times 10^8 \sim 2 \times 10^9 \text{ phs/s/100 mA}$  范围内, 经单色仪分光, 能量分辨率 ( $E/E$ ) 优于  $5 \times 10^{-4}$ , 达到了原定的设计指标, 满足了所预期的实验要求。

## 参考文献:

- [1] 徐朝银. X 射线衍射和散射光束线设计 [J]. 中国科学技术大学学报, 1999, 29 (2): 181-188.  
XU CH Y. The design of a beamline for X-ray diffraction and scattering experiment [J]. *Univ Sci Technol China*, 1999, 29 (2): 181-188. (in Chinese)
- [2] 徐朝银. X 射线衍射和散射光束线的环面聚焦镜设计 [J]. 中国科学技术大学学报, 2000, 30: 162-168.  
XU CH Y. Design of the toroidal focusing mirror for the XRD beamline [J]. *Univ Sci Technol China*, 2000, 30: 162-168. (in Chinese)
- [3] 王峰. 同步辐射 X 射线双晶单色仪能量扫描 [J]. 光学 精密工程, 2001, 9 (4): 400-404.  
WANG F. Energy scanning of the double crystal monochromator at X-ray beamlines [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2001, 9 (4): 400-404. (in Chinese)
- [4] JEAN S. Design parameters for hard X-ray mirrors: the European synchrotron radiation facility case [J]. *Optical Engineering*, 1995, 34 (2): 361-375.
- [5] 程曙初. 同步辐射超光滑 X 光学元件的加工工艺及检测技术的研究 [J]. 光学 精密工程, 1994, 2 (4): 69-78.  
CHENG SH CH. Study on fabrication and testing of supersmooth soft X-ray optical element for synchrotron radiation [J]. *Optics and Precision Engineering*, 1994, 2 (4): 69-78. (in Chinese)

作者简介: 黄志刚 (1974-), 男, 江西抚州人, 现为中国科学技术大学国家同步辐射实验室研究生;

徐朝银 (1946-), 男, 安徽马鞍山人, 现为中国科学技术大学国家同步辐射实验室博士生导师, 主要研究方向为同步辐射光束线。