

文章编号 1004-924X(2006)02-0224-05

压弯光栅线密度变化分析

刘斌,王秋平,徐向东,付绍军

(中国科学技术大学 国家同步辐射实验室,安徽 合肥 230029)

摘要:理论上给出了光栅在子午面内弯曲为任意面形后,光栅线密度的变化关系,并采用有限元分析软件 ABAQUS/Standard 进行了模拟分析。理论与模拟分析的结论说明,压弯后光栅线密度是由光栅本身参数及压弯面形严格决定的。在此基础上设计一个简单的单色器,并在数值上给出了压弯后光栅线密度变化对单色器件性能的影响。由于光栅面形及其线密度的变化,不仅对光栅成像的聚焦特性有所改善,对彗差等高阶次像差的影响也是不可忽略的。

关键词:压弯光栅;线密度;有限元法

中图分类号:O436.1 **文献标识码:**A

Analysis of groove density for diffraction grating during bending

LIU Bin, WANG Qiu-ping, XU Xiang-dong, FU Shao-jun

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

Abstract: In order to derive the effect of an arbitrary bending curve in tangential orientation on a grating, a general expression about the transform of groove density was represented in theory, and simulated by Finite Element Method (FEM) using ABAQUS/Standard. The results show that the groove density was severely determined by the attribute of diffractive grating and bending curve. Sequentially, the imaging properties of grating monochromator due to bending were numerically pointed out with a simple example. As a result of shape change and groove density variation, it not only improves the focusing condition, but also affects higher order aberrations such as coma aberration of the imaging system.

Key words: bending grating; groove density; FEM

1 引言

近年来,同步辐射技术得到了迅猛的发展,其应用领域也越来越广阔,不仅涵盖了物理、化学、生物等基础学科,还活跃在材料科学、表面科学、

辐射计量学、医学、生命科学、环境科学、地质科学、超微细加工、超大规模集成电路光刻等技术研究领域。光束线是其中的重要环节,是同步辐射储存环和用户实验装置连接的桥梁,而单色器是其中的核心部分。迄今,在 soft-X-ray 波段发展了罗兰圆、SX-700、Dragon、变包含角(VASGM)

收稿日期:2005-10-08;修订日期:2006-01-14.

基金项目:教育部 211 工程课题(No. W15211070200)

和变线距(VLS)光栅等各具特色的单色器,能够胜任同步辐射不同实验站的技术要求。

VLS 光栅具有消像差、自聚焦的能力,采用一块 VLS 光栅即可覆盖很宽的光谱范围,并且可以减少单色器的复杂性和因反射造成的通量损失,VLS 光栅逐渐广泛应用于单色器的设计^[1-2]。为了进一步提高单色器的分辨率及光子通量,近年来,研究者在压弯(变曲率)光栅单色器展开了探索。压弯光栅单色器是一种高级的单色器,具有以下特点:出射狭缝固定,不需扫描;转动光栅并调整光栅面形,即可在单色器波长范围内消除一定阶次像差,并能达到高的分辨率和高光子通量。由光栅像差理论可知:入射光经光栅衍射后,成像质量是由光栅面形与其刻线条纹决定的,而光栅在压弯的过程中,线密度会随其面形变化而发生改变。所以,在压弯光栅单色器的设计中,光栅面形与其线密度需综合考虑。Palmer、McKinney 推导了 VLS 平面光栅压弯成圆柱面后光栅线密度的变化关系式,按照一定规律弯曲光栅可在单色器波长范围内消除离焦像差^[3]。随后,S. J. Chen、C. T. Chen 研制了高精度的压弯机构,能精确控制光栅面形为三次项式(二、三次项系数分别影响离焦及彗差),并由此设计并研制了消离焦和彗差的压弯光栅单色器^[4],在其设计理念中,忽略了光栅弯曲后线密度变化带来的影响。

本文采用有限元的方法,分析了压弯作用下,光栅线密度的变化关系。在此基础上,设计了一个简单的单色器,理论上计算了线密度变化对其光栅成像质量的影响。

2 光栅线密度与其面形的对应关系

平面光栅在子午面内弯曲成任意曲面后,其线密度的表达式已经被推导^[5],在压弯光栅单色器的设计中具有深刻的指导意义。本节简要介绍其基本原理:首先假定平面 VLS 光栅的线密度表达式为:

$$N(x) = N_0(1 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + b_4x^4 + \dots), \quad (1)$$

其中 N_0 为光栅原点 O 处的线密度, $b_1 \sim b_4$ 分别为 VLS 光栅线密度的变化参数,如图 1 所示:虚线描述的为压弯前的平面光栅,其条纹刻线方向

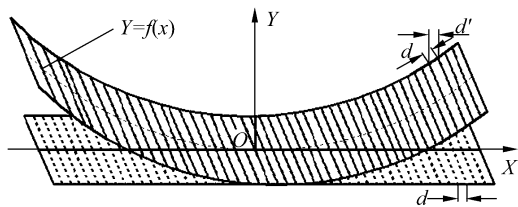


图 1 压弯前后光栅线密度关系示意图

Fig. 1 Grating groove density transform before and after bending

垂直于平面 XOY , Y 轴为平面光栅基底的法线方向。光栅在子午面(XOY)内弯曲,原点 O 固定不动,假设压弯后光栅的面形函数为: $Y=f(x)$ 。在实际应用中,光栅弯曲程度较小(即曲率半径比较大),纵向的拉伸变形可以忽略,所以第 n 条刻线的线间距 d 及其沿光栅基面到原点 O 的曲线长度保持不变。而投影到 x 方向后的线间距 d' 与原刻线间距 d 由面形函数决定。综合以上两种变换,投影到 x 方向的线密度表达式为:

$$N'(x) =$$

$$N \left(\int_0^x [1 + f'(x)^2]^{1/2} dx \right) (1 + f'(x)^2)^{1/2}, \quad (2)$$

3 光栅压弯的有限元分析

在同步辐射压弯镜^[6]及压弯机构^[7-8]的设计中,常采用有限元法(finite element method)进行分析。压弯镜已经广泛使用在同步辐射光束线中,其压弯技术比较成熟。光栅与压弯镜区别仅在于样品尺寸及材料的不同,所以在光栅压弯的设计中,可以借鉴压弯镜的压弯方案。如图 2(a)所示:通过在镜子两端加入两不等的弯曲力矩 M_1 和 M_2 ,可以获得理想的三次多项式面形^[9],其压弯后面形函数为:

$$EI \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{M_1 + M_2}{2} - \frac{M_1 - M_2}{2}x, \quad (3)$$

其中 EI 为光栅材料的抗弯刚度。本文采取 ABAQUS/Standard 有限元分析软件,对压弯过程中光栅的线密度变化进行模拟。首先对光栅基底进行网格划分,节点代表光栅的一条刻线;然后在端面施加载荷,通过计算各节点的信息,进行数学拟合得到光栅线密度的变化情况。为使模拟更加真实可靠,需大量增加划分的节点数目,为此会降低计算的速度。为简单起见,选择了同等大小

的弯力矩 M 进行模拟,由公式(3)可知:弯曲后理想的面形是一个二次函数。由于具有对称性,可以通过限制原点 O 处截面的所有自由度,而只在右侧施加力矩 M 的方式简化计算。选用有机玻璃 PMMA 作为基底材料,尺寸为 $100\text{ mm} \times 20\text{ mm} \times 1\text{ mm}$,弹性模量 E 为 3.3 GPa ,泊松比 μ 为 0.37 。施加弯矩 $M(55\text{ N} \cdot \text{mm})$ 后,模拟结果如图 2(b)所示:光栅压弯后,基底在长度方向并没有明显的拉伸现象,这与上一节推导公式前的假设是相符合的。

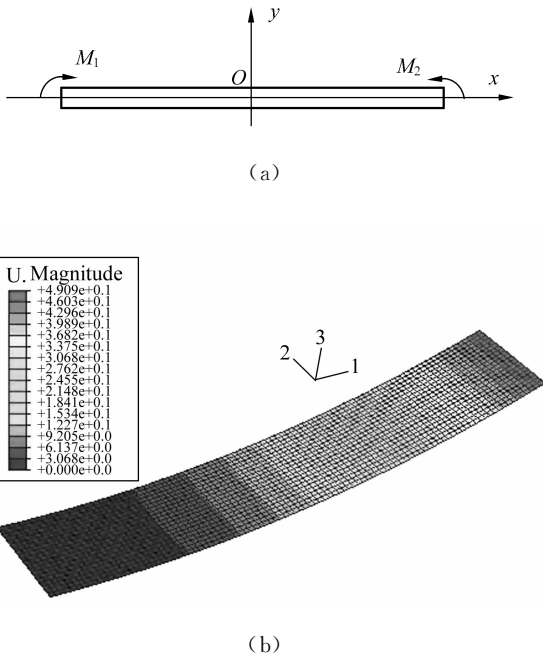


图 2 光栅压弯的建模(a)及模拟结果示意图(b)

Fig. 2 Modeling (a) and schematic simulation (b) on a grating during bending

对划分的节点信息进行数据拟合可得到如图 3 所示的弯曲面形,光栅只在子午面内弯曲,在弧矢面并没有明显的变形。假设光栅为等间距且 N_0 为 $1\ 000\text{ mm}^{-1}$,将以上各参数代入式(3)中可得到其理想弯曲面形 $f(x)$,再由公式(2)可得光栅线密度的理论表达式:

$$N_{\text{theory}}(x) = N_0 \sqrt{1 + \left(\frac{Mx}{EI}\right)^2}, \quad (4)$$

其理论值如图 4a 所示。截取各节点 x 方向的位置信息(如图 2(b)中方向 1),即可得到压弯后光栅的线密度的模拟值 $N_{\text{simulation}}(x)$,如图 4(b)。图 4(c)中是理论值与模拟值之差。其中理论计算值是按材料力学的方法计算的,倘若对压

弯后光栅面形进行数学拟合,得到模拟的弯曲面形,再代入公式(2)进行计算,如此得到的理论值则与 $N_{\text{simulation}}(x)$ 更为吻合。为了验证第二节公式推导的正确性,以上分析了大弯曲状况下线密度的变化关系,并因此选取了弹性模量较小的 PMMA 做为光栅基底材料。由于压弯光栅单色器一般工作在小弯曲的模式下,所以在实际计算中,压弯光栅线密度由其压弯后面形决定即可。

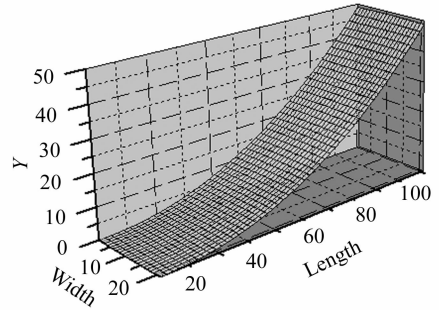


图 3 光栅压弯后的形貌图

Fig. 3 Surface profile of a bending grating

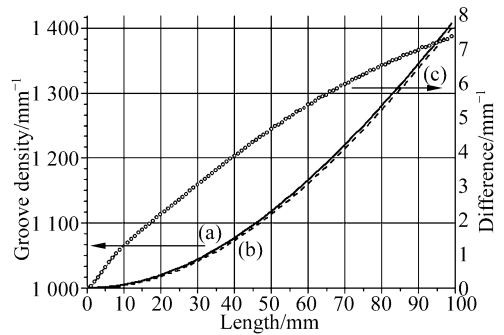


图 4 压弯光栅的线密度分析

Fig. 4 Analysis of the groove density for bending grating

4 线密度的变化对成像质量的影响

在罗兰圆的工作模式基础上进一步拓展,将光栅压弯成如式(5)所示的面形,有助于消除高阶次像差,如 Coma 像差^[5],从而进一步提高光栅的成像性能 $c_2 = \frac{1}{2R}$,其中(R 为原点 O 处的曲率半径)。压弯作用下的光栅,成像质量的改善不仅源于其几何光程的改变,还与线密度变化息息相关^[5]。本节在理论上设计了一个简单的固定包含角等间距(CLS)的压弯光栅单色器,通过计算其

参数,可以衡量线密度的变化对成像质量影响,其参数如表 1 所示。

表 1 固定包含角单色器的一些参数

Tab. 1 Some parameters of the constant-deviation monochromator

Wavelength λ (nm)	2.0~4.0
Groove density N_0 (mm ⁻¹)	1000
Half deviation angle K (°)	87
Entrance slit distance r_1 (m)	1
Exit slit distance r_2 (m)	1

$$Y = c_2 x^2 + c_3 x^3, \quad (5)$$

$$N(x) = N_0 (1 + 2c_2^2 x^2), \quad (6)$$

$$F_1 = -(\sin \alpha + \sin \beta) + N_0 m \lambda, \quad (7)$$

$$F_2 = \frac{\cos \alpha}{2} \left(\frac{\cos \alpha}{r_1} - 2c_2 \right) + \frac{\cos \beta}{2} \left(\frac{\cos \beta}{r_1} - 2c_2 \right), \quad (8)$$

$$F_3 = -c_3 \cos \alpha + \frac{\sin \alpha \cos \alpha}{2r_1} \left(\frac{\cos \alpha}{r_1} - 2c_2 \right) - c_3 \cos \beta + \frac{\sin \beta \cos \beta}{2r_2} \left(\frac{\cos \beta}{r_2} - 2c_2 \right) + \frac{2}{3} c_2^2 N_0 m \lambda, \quad (9)$$

$$c_2 = \left(\frac{\cos^2 \alpha}{2r_1} + \frac{\cos^2 \beta}{2r_2} \right) / (\cos \alpha + \cos \beta), \quad (10)$$

$$c_3 =$$

$$\left(\frac{\sin \alpha \cos \alpha}{2r_1} \left(\frac{\cos \alpha}{r_1} - 2c_2 \right) + \frac{\sin \beta \cos \beta}{2r_2} \left(\frac{\cos \beta}{r_2} - 2c_2 \right) + \frac{2}{3} c_2^2 (\sin \alpha + \sin \beta) \right) / (\cos \alpha + \cos \beta). \quad (11)$$

为使讨论更为简洁明晰,首先假设光栅为平面等间距的(线密度为 N_0),并且只分析到三阶像差(彗差)。将式(5)代入式(2)可得光栅弯曲后的线密度表达式,如式(6)所示。结合光程函数理论(light path function),可推导一般意义上的像差解析表达式^[5],其展开项:光栅方程、子午面聚焦及彗差项(Coma)如式(7)~(9)所示,其中 α, β 分别为入射角及衍射角, r_1, r_2 为入射臂与出射臂。由式(6)~(9)可知:平面 CLS 光栅压弯后,光栅线密度的一次项系数并不改变(仍为零),所以压弯后光栅在子午面聚焦的性能影响等效于凹面光栅(镜),即只取决于光栅面形;与之不同的是,光栅线密度的二次项系数与曲率的平方成正比,所以压弯光栅对彗差的影响是光栅面形与线密度的综合效果。为了在单色器波长范围内满足聚焦条

件并消除彗差,只需求解式(7)~(9),使得 $F_1 = F_2 = F_3 = 0$,依次得到 c_2, c_3 ,即决定了其理想弯曲面形,如式(10)~(11)。而当忽略压弯后光栅线密度变化的影响时, c_2 仍由式(10)决定,并没有误差; c_3 则不再由式(11)决定,而是由式(11)中几何光程部分决定的。因此计算的 c_3 实际上只消除了几何光程引起的彗差,线密度变化引起的彗差部分仍然存在,称之为彗差残余值,其值 F_3' 为 $\frac{2}{3} c_2^2 (\sin \alpha + \sin \beta)$ 。图 5 描述的是该单色器压弯后光栅线密度变化引起的彗差残余值,由此可知:在设计高分辨率压弯光栅单色器时,因光栅压弯引起的光栅线密度变化对单色器的性能影响也是不可忽略的。

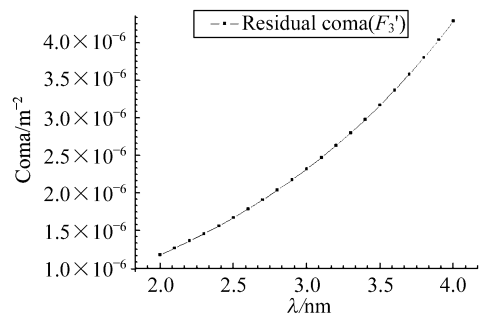


图 5 弯曲后光栅线密度变化引起的彗差项

Fig. 5 Residual coma due to groove density variation after bending curve

5 结 论

本文在理论上推导了光栅在子午面任意压弯后,光栅线密度的变化关系,并采用有限元软件 ABAQUS/Standard 对其进行了模拟。最后理论上设计一个简单的单色器,在数值上给出了压弯后光栅线密度变化对单色器性能的影响。有关结论可以推广到压弯任意面形 VLS 光栅单色器的应用中去,尤其在高分辨率单色器设计中,压弯后引起的光栅线密度变化需高度重视。

致谢: 本文由教育部“211 工程”(No. W15211070200)资助,感谢郭育华、董晓浩、凤良杰博士在软件方面有益的讨论。

参考文献:

- [1] FUJISAWA M, HARASAWA A, *et al.* Varied line-spacing plane grating monochromator for undulator beamline [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1996, 67 (2): 345-349.
- [2] WARWICK T, HOWELLS M. A variable radius mirror for imaging the exit slit of a spherical grating monochromator undulator beamline at the ALS [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1995, 66 (2): 2270-2272.
- [3] PALMER C, MCKINNEY W R. Imaging properties of varied line-space (VLS) gratings with adjustable curvature [J]. *SPIE*, 1998, 3450: 87-102.
- [4] CHEN S J, CHEN C T. Design and fabrication of an active polynomial grating for soft-X-ray monochromators and spectrometers [J]. *Nucl. Instrum. Methods in Physics Research A*, 2001, 467-468: 298-301.
- [5] LIU B, HU ZH W, WANG Q P, *et al.* Generalized groove density equation concerning bending grating related imaging properties [J]. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 2006, 23(5): 1135-1140.
- [6] FERME J J, DAHAN G. Bendable mirrors [J]. *SPIE*, 1998, 3447: 72-80.
- [7] 曲艳峰, 吕丽军. 同步辐射仪器中柔性铰链压弯机的研究 [J]. *光学精密工程*, 2002, 10(2): 220-225.
QU Y F, LV L J, Research on the flexural hinge-based bender in a synchrotron radiation instrument [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2002, 10(2): 220-225. (in Chinese)
- [8] 柳晖, 高雪官. 同步辐射单色器冷却压弯机构 [J]. *光学精密工程*, 2004, 12(6): 608-613.
LIU H, GAO X G, Monochromator cooling bender in synchrotron radiation [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2004, 12(6): 608-613. (in Chinese)
- [9] MALCOM R, CAMBIE H D, DUARTE R M. Theory and practice of elliptically bent X-ray mirrors [J]. *Opt. Eng.*, 2000, 39(10): 2748-2762.

作者简介: 刘 斌(1980—), 男, 江西吉安人, 2001年获中国科学技术大学精密机械与精密仪器专业学士学位。2001年至今为该校国家同步辐射实验室在读博士研究生, 研究方向为光学检测、光栅成像理论与压弯光栅。