

## 透射光栅的实验标定和衍射效率的理论模拟\*

尚万里<sup>1)</sup> 朱托<sup>1)</sup> 熊刚<sup>1)</sup> 赵阳<sup>1)</sup> 张文海<sup>1)</sup> 易荣清<sup>1)</sup> 况龙钰<sup>1)</sup> 曹磊峰<sup>1)</sup> 高宇林<sup>1)</sup>  
 杨家敏<sup>1)†</sup> 赵屹东<sup>2)</sup> 崔明启<sup>2)</sup> 郑雷<sup>2)</sup> 韩勇<sup>2)</sup> 周克瑾<sup>2)</sup> 马陈燕<sup>2)</sup>

1) (中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

2) (中国科学院高能物理研究所, 北京 100049)

(2010年4月8日收到; 2010年5月1日收到修改稿)

透射光栅广泛应用于软 X 射线能谱测量. 为了获得用于惯性约束聚变研究的透射光栅的各级衍射效率及其他参数, 在北京同步辐射源上 200—1600 eV 能量范围内对其进行了标定, 获得了透射光栅衍射效率的实验结果. 扩展了透射光栅衍射效率的计算方法, 提出了 7 边准梯形截面衍射效率计算模型. 分析拟合了实验数据, 理论结果与实验结果很好符合. 得到了 7 边准梯形的透射光栅栅线截面结构.

**关键词:** 透射光栅, 衍射效率, 实验标定, 光栅模型

**PACS:** 42.79.Dj, 42.40.Lx, 06.20.fb, 07.85.Jy

## 1. 引言

激光与等离子体相互作用中相当大部分的激光能量被等离子体吸收后转化为 X 射线辐射, 而亚千能区的软 X 射线辐射占整个等离子体辐射的绝大部分. 因此, 通过诊断激光等离子体发射的软 X 射线谱, 可以研究激光与物质的相互作用、等离子体中的原子物理过程及高温物质的特性等. 而透射光栅在软 X 光能谱测量中作为一种重要的色散元件得到了广泛应用<sup>[1-5]</sup>. 国内外的研究者对于透射光栅和透射光栅光谱仪做了大量的工作<sup>[6-17]</sup>. 为了能用透射光栅进行软 X 射线能谱的定量测量, 必须知道其衍射效率. 为此, 对于许多国内外实验室来说, 需要对自己使用的透射光栅进行一系列的实验标定和理论模拟计算. 1977 年, Schnopper 等人在斯坦福同步辐射源上标定了 1000 l/mm 光栅在 45—275 eV 能量范围内的衍射效率, 发现 X 射线能部分透过金栅线, 产生异常色散, 并通过计算很好的解释了该现象<sup>[18]</sup>. 1979 年, Brauningner 标定了 1000 l/mm 在 276—2300 eV 能量范围内的衍射效率, 建立了梯形栅线模型, 模型与标定结果符合较好<sup>[19]</sup>. 上世纪 90 年代后期, 杨家敏等人在透射光栅衍射效率

领域做了大量的研究工作, 在 150—1500 eV 能量范围内标定了多块透射光栅的衍射效率, 并提出了准梯形栅线模型, 较好的符合了标定数据<sup>[20-22]</sup>.

在北京同步辐射源上, 我们利用单色性很好的软 X 射线源, 对用于惯性约束聚变研究的透射光栅进行了实验标定, 给出了光栅的重要结构参数. 并且在国内外的衍射效率理论模型基础上, 扩展了透射光栅衍射效率的计算模型, 考虑了更丰富更贴近实际的光栅栅线结构, 提出了 7 边准梯形截面衍射效率计算模型和 9 边准梯形截面衍射效率计算模型. 利用扩展后的理论模型, 对透射光栅的衍射效率进行了计算, 模拟结果很好的重复了实验结果.

## 2. 实验标定

实验是在北京同步辐射装置软 X 射线束线站上完成的. 标定实验布局如图 1 所示. 同步辐射源发出的白光经平面镜反射到平场光栅上, 调整平面镜的入射角可以使白光以不同的入射角入射到平场光栅上, 从而可以在平场光栅固定的出射方向上获得不同能量的单色光, 本实验使用该单色器获得的 80—1600 eV 能区的单色光. 单色光后装有抑制镜箱, 抑制镜箱内装有三组镀有不同膜的反射镜, 镜

\* 国家高技术研究发展计划资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: yjm70018@my-public.sc.cninfo.net

架可以垂直于入射平面运动,因而能在不同的能段采用不同的反射镜抑制高次谐波,同时也可以使三组反射镜退出光路不做任何谐波抑制. 标定靶室是连接在镜箱后的,标定靶室中沿光路分别安装了滤片架、光阑、快门、样品架和标准探测器,在靶室后安装了一个 X 射线 CCD 记录透射光栅衍射图像. 滤片架能垂直光路上下移动,在滤片架上安放多块滤片,可以在不同能段根据不同的谐波抑制需要或者衰减光强需要选择合适的滤片,滤片架上也保留了一个通孔,能将不做谐波抑制的入射光放过. 滤片

放置情况及有无滤片时谐波份额情况见表 1. 滤片架后安装一个直径 4 mm 的光阑以限制杂散光. 为了控制通光量并避免 CCD 上的拖影,在光阑后加装了一个机械快门. 快门后是样品架,样品架上安放了透射光栅和狭缝,样品架能垂直于光路上下移动,调节样品架可以使光栅和狭缝分别处于光路中,以测量色散谱和光源强度. 典型的衍射光强度分布如图 2 所示(Cu 滤片,750 eV). 对透射光栅各衍射级曲线进行积分得到各积分计数,各级衍射积分计数之比即为相对衍射效率.

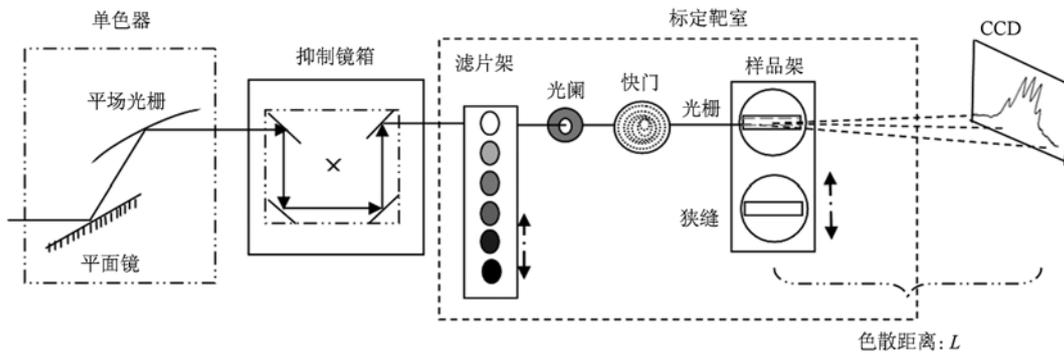


图 1 实验布局示意图

表 1 不同能区的滤片配置及有无滤片时的谐波份额

滤片	能量/eV	厚度/( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ )	谐波份额/%	
			无滤片	有滤片
C	150—280	283	<3.5	<2.3
Ti	280—450	267	<6	<4
Cu	450—900	440	<4	<2
Al	900—1500	4050		
无滤片	1500—1600			

### 3. 光栅模型

关于光栅的衍射效率模拟,已有不少科研工作者进行了卓有成效的研究. 1964 年, Born 和 Wolf 利用矩形栅线结构对光栅衍射效率进行了模拟<sup>[23]</sup>. 后来, Schnopper 等人在矩形栅线截面衍射效率模型的基础上,考虑了 X 射线对栅线的穿透,对其在斯坦福同步辐射源上标定的光栅衍射效率进行了模拟<sup>[18]</sup>. Brauningner 等人沿袭了 Schnopper 等人的光栅衍射效率计算方法,只是将其中的矩形栅线截面替代为梯形栅线截面,使其更加贴近电子沉积刻蚀得到的光栅栅线<sup>[19]</sup>. 杨家敏等人继续扩展了 Brauningner 等人的衍射效率模型,提出了准梯形来代替梯形的计算方法<sup>[22]</sup>.

当透射光栅栅线截面为矩形时,由矩形模型计算知道,透射光栅的二级衍射强度与一级衍射强度之比,以及三级衍射强度与一级衍射强度之比,仅与光栅占空比有关,而与入射 X 射线波长无关. 从表中测量结果看到,该透射光栅的二级与一级衍射强度之比和三级与一级衍射强度之比随 X 射线能量变化而具有明显的变化,所以该透射光栅的栅线

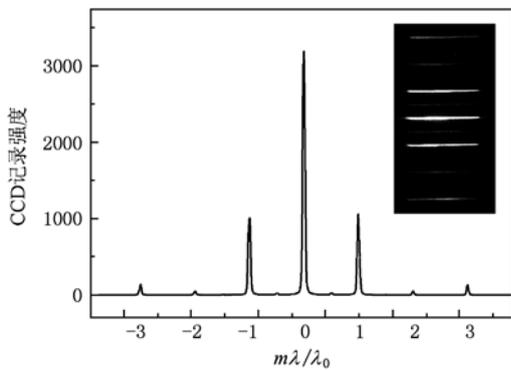


图 2 典型的衍射光强度分布 (Cu 滤片, 750 eV)

截面是偏离矩形的. 根据光栅制作工艺, 光栅栅线截面表层直角可能被刻蚀掉. 为了更接近光栅栅线情况, 我们扩展了杨家敏等提出的 5 条边的准梯形栅线截面模型, 用 7 条边的栅线截面来代替, 称之为 7 边准梯形栅线截面. 见图 3. 图中①—⑤分别对应于线段  $[(x_0, y_0) - (x_1, y_0)]$ ,  $[(x_1, y_1) - (x_2, y_2)]$ ,  $[(x_2, y_2) - (x_3, y_3)]$ ,  $[(x_3, y_3) - (x_4, y_4)]$ ,  $[(x_4, y_4) - (x_5, y_5)]$  和  $[(x_5, y_5) - (x_6, y_6)]$ .  $c_l (l = 0, 5)$  分别对应上述 6 条线段斜率, 其中  $c_0 = c_3 = 0$ . 则栅线厚度为  $z = z_l + c_l(x - x_l)$ . 透射光栅的周期为  $d = x_6 = 0.476 \mu\text{m}$ .

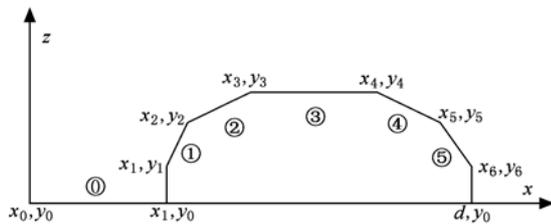


图 3 7 边准梯形栅线截面

假设 X 射线垂直入射透射光栅, 在远场条件下采用夫朗和费衍射近似, 经过波动光学的计算推导出透射光栅  $m$  级绝对衍射效率为

$$I_{(m)} = I_0(1 - f) \frac{1}{d^2} \left| \sum_{l=0}^5 f_{l,m} \right|^2, \quad (1)$$

$I_0$  为入射光强度.  $f$  为透射光栅支撑结构所占面积比. 下面我们分情况分析上式.

1) 对于零级衍射,  $m = 0$

a. 当栅线斜率为 0, 即  $l = 0, 3$  时

$$\begin{aligned} f_{l,0} &= \int_{x_l}^{x_{l+1}} \exp ikz(\delta + i\beta) dx \\ &= \exp ikz(\delta + i\beta) \cdot (x_{l+1} - x_l). \end{aligned} \quad (2)$$

b. 当栅线斜率不为 0 时, 即  $l = 1, 2, 4, 5$  时,  $z = z_l + c_l(x - x_l)$ ,

$$\begin{aligned} f_{l,0} &= \int_{x_l}^{x_{l+1}} \exp ikz(\delta + i\beta) dx \\ &= \frac{\exp[-k\beta(z_l - c_l x_l) + ik\delta(z_l - c_l x_l)]}{-k\beta c_l + ik\delta c_l} \\ &\quad \times \left[ \exp(-k\beta c_l x_{l+1} + ik\delta c_l x_{l+1}) \right. \\ &\quad \left. - \exp(-k\beta c_l x_l + ik\delta c_l x_l) \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

2) 对于一级、二级、三级衍射,  $m \neq 0$

$$f_{l,0} = \int_{x_l}^{x_{l+1}} \exp ikz(\delta + i\beta) \exp i \frac{2m\pi x}{d} dx$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\exp[-k\beta(z_l - c_l x_l) + ik\delta(z_l - c_l x_l)]}{-k\beta c_l + i(k\delta c_l + \frac{2m\pi}{d})} \\ &\quad \times \left[ \exp\left(-k\beta c_l x_{l+1} + i\left(k\delta c_l + \frac{2m\pi}{d}\right)x_{l+1}\right) \right. \\ &\quad \left. - \exp\left(-k\beta c_l x_l + i\left(k\delta c_l + \frac{2m\pi}{d}\right)x_l\right) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

上式中,  $1 - \delta, \beta$  分别为金栅线材料的光学常数的实部和虚部,  $k = 2\pi/\lambda$  为光波波数.

为了验证上述 7 边准梯形模型的正确性, 我们选取了  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$  三点十分接近,  $(x_4, y_4), (x_5, y_5), (x_6, y_6)$  三点十分接近的栅线截面, 此时栅线截面近似为矩形. 利用以上的光栅衍射效率计算模型, 取占空比为 0.3, 光栅栅线厚度为  $0.4 \mu\text{m}$ ,  $f$  为 0, 计算得到的零级到二级绝对衍射效率, 与网络<sup>[24]</sup>给出的同样栅线截面条件下的零级到二级绝对衍射效率进行了对比. 见图 4(a). 可以看到, 网络参考值与 7 边准梯形模型计算出的结果很好地符合. 这充分说明了我们的 7 边准梯形模型的正确性, 我们将用其分析模拟此次光栅标定实

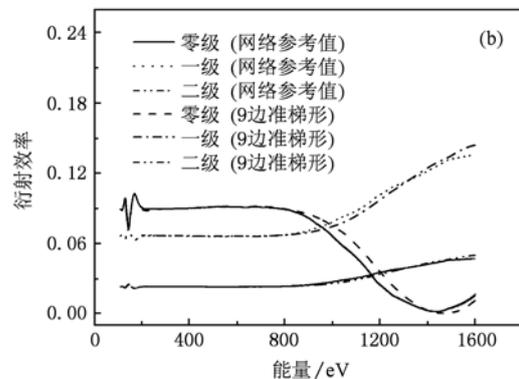
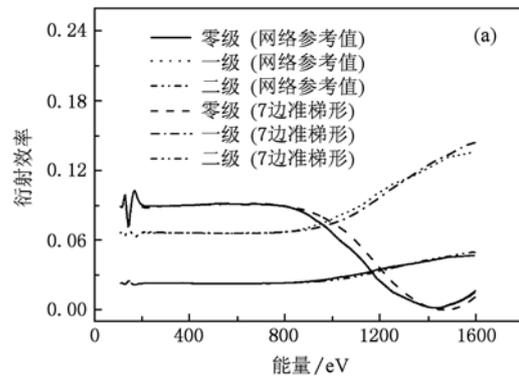


图 4 (a) 7 边准梯形模型所得结果与网络参考值的对比; (b) 9 边准梯形模型所得结果与网络参考值的对比 ( $a/d = 0.3, z = 0.4 \mu\text{m}$ )

验结果. 此外, 还将模型中的 7 边准梯形推广到 9 边准梯形, 图 4(b) 为同样栅线截面条件下, 9 边准梯形模型计算得到的光栅衍射效率与网络参考值的对比, 两者很好地符合.

#### 4. 结果分析与模拟

在光栅衍射效率的矩形模型中, 可以由任意两组非零级绝对衍射效率的比值来确定栅线截面的占空比, 而由确定的光栅占空比和非零级与零级绝对衍射效率之比可以求得光栅的栅线厚度. 而在我们的标定结果中, 由于栅线截面偏离矩形甚远, 随着光子能量的变化, 二级一级比和三级一级比变化很大, 无法确定栅线截面的占空比. 在计算过程中, 采用逐个扫描法, 对每一组栅线截面求二级与一级和三级与一级的相对衍射效率, 并与标定结果进行对比, 得到最佳的二级与一级和三级与一级比值, 从而确定栅线截面的各个参数. 图 5(a) 为运用 7 边准梯形模型计算得到的二级与一级相对衍射效率, 图

5(b) 为三级与一级相对衍射效率. 图中可以看到, 实验标定结果与数值模拟结果较好地符合. 栅线截面各种参数为  $x_1 = 0.245 \mu\text{m}$ ,  $y_1 = 0.025 \mu\text{m}$ ,  $x_2 = 0.26 \mu\text{m}$ ,  $y_2 = 0.155 \mu\text{m}$ ,  $x_3 = 0.31 \mu\text{m}$ ,  $y_3 = 0.427 \mu\text{m}$ . 栅线截面如图 6. 可以看到, 栅线截面完全偏离了矩形结构. 光栅占空比为 0.515, 栅线厚度为  $0.427 \mu\text{m}$ .

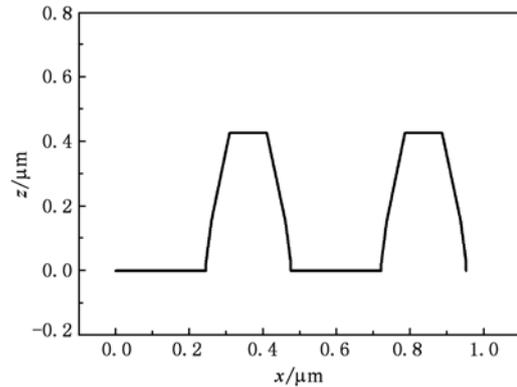


图 6 7 边形的栅线截面

图 7 为透射光栅支撑结构所占面积比为 0.4 时, 上述栅线截面情况下 7 边准梯形模型得到的零级到三级绝对衍射效率. 图中可以看到, 由于占空比接近 0.5, 二级绝对衍射效率较小. 然而随着入射 X 射线能量增大, 栅线截面厚度较小部分逐渐变得透明, 等效栅线截面宽度减小, 光栅占空比逐渐变大, 偏离 0.5, 于是二级绝对衍射效率随着光子能量增加而变大. 与此同时, 随光子能量增大, 占空比变大且偏离 0.5, 一级绝对衍射效率变小, 导致二级一级相对衍射效率随光子能量增大而增大. 图 7 和图 5(a) 很好地证明了这一点. 实验结果与理论模拟分析很好的达到统一.

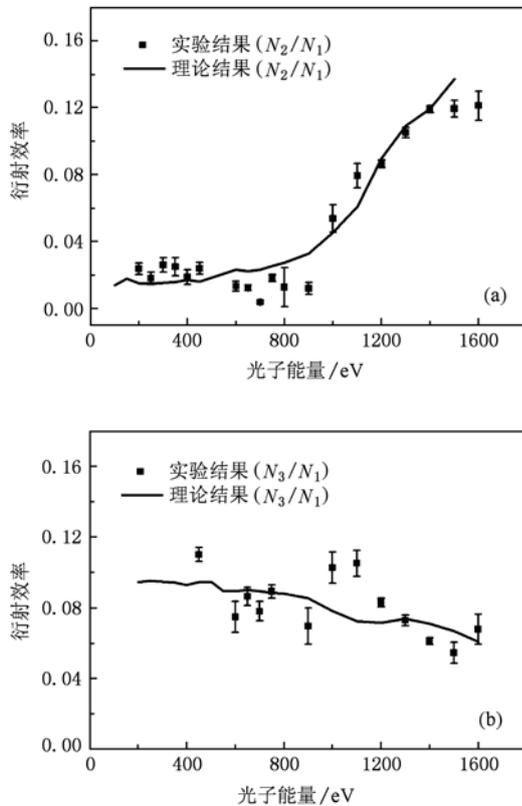


图 5 (a) 透射光栅二级与一级衍射效率比值实验标定与理论计算的比较; (b) 三级与一级衍射效率比值实验标定与理论计算的比较

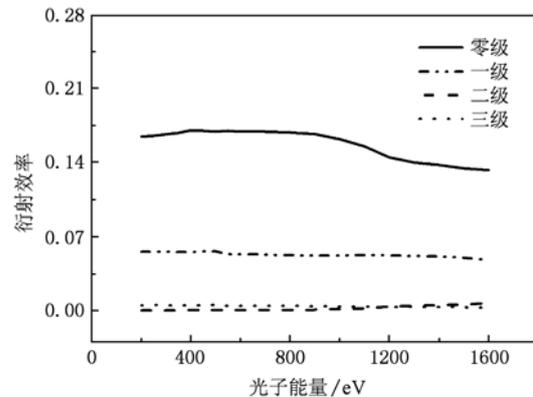


图 7 绝对衍射效率( $f=0.4$ )

## 5. 结 论

在北京同步辐射源上用单色性很好的软 X 射线作光源, 对用于惯性约束聚变研究的透射光栅进行了实验标定, 给出了光栅的重要结构参数. 扩展了透射光栅衍射效率计算方法, 提出了 7 边准梯形栅线截面衍射效率计算模型和 9 边准梯形栅线截面

衍射效率计算模型, 并验证了其正确性. 结合实验标定结果, 利用 7 边准梯形栅线截面衍射效率模型, 分析拟合了二级与一级和三级与一级相对衍射效率, 理论结果与实验结果很好地符合. 然而, 理论计算曲线与实验结果仍有少数能点存在一定差异, 这需要进行完善实验方法, 提高实验测量精度, 同时确认所用光学常数的不确定度及光栅栅线截面参数.

- [1] Dijkstra J H, Lantwaard L J 1975 *Opt. Commun.* **15** 300
- [2] Brauning H, Kraus H, Dangschat H, Beuermann K P, Predehl P, Trumper J 1979 *Appl. Opt.* **18** 3502
- [3] Arakawa E T, Caldwell P J 1980 *Nucl. Instrum. and Meth.* **172** 293
- [4] Hawryluk A M 1981 *J. Vac. Sci. Tech.* **19** 897
- [5] Bionta R M 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 725
- [6] Eidmann K, Kishimoto T, Herrmann P, Mizui J, Pakula R, Sigel R, Witkowski S 1986 *Laser and Part. Beams.* **4** 521
- [7] Mochizuki T, Yabe T, Okada K, Hamada M, Ikeda N, Kiyokawa S, Yamanaka C 1986 *Phys. Rev. A* **33** 525
- [8] Tsakiris G D, Herrmann P, Pakula R, Schmalz S, Sigel R, Witkowski S 1986 *Europhys. Lett.* **2** 213
- [9] Ceglio N M, Kauffman R L, Hawryluk A M, Medeck H 1983 *Appl. Opt.* **22** 318
- [10] Matthews D L, Hagelstein P L, Rosen M D, Eckart M J, Ceglio N M, Hazi A U, Medeck H, MacGowan B J, Trebes J E, Whitten B L, Campbell E M, Hatcher C W, Hawryluk A M, Kauffman R M, Pleasance L D, Rambach G, Scofield J H, Stone G, Weaver T A 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 110
- [11] Li Y L, Bai W A, Chen S S, Xu Z Z 1989 *Acta Optica Sinica* **9** 550 (in Chinese) [李跃林、白文安、陈时胜、徐至展 1989 光学学报 **9** 550]
- [12] Wang Z S, Tian Z H, Chen B, Wang z, Gao J S, Tian X Z, Chen Z W, Fan P Z, Chen X D 1999 *Spectroscopy and Spectral Analysis* **19** 875 (in Chinese) [王占山、田振华、陈斌、王智、高劲松、田兴志、陈志伟、范品忠、陈星旦 1999 光谱学与光谱分析 **19** 875]
- [13] Deng J, Zhong F C, Qin L, Zhang Z Q, Xu Z Z 2000 *Acta Optica Sinica* **20** 647 (in Chinese) [邓健、钟方川、覃岭、张正泉、徐至展 2000 光学学报 **20** 647]
- [14] Zhao Y D, Cui M Q, Zhu P P, Cui C W 2000 *High Energy Physics and Nuclear Physics* **24** 1403 (in Chinese) [赵屹东、崔明启、朱佩平、崔聪悟 2000 高能物理与核物理 **24** 1043]
- [15] Zhu W Z, Wu Y Q, Guo Z, Zhu X L, Ma J, Xie C Q, Shi P X, Zhou H J, Huo T L, Tai R Z, Xu H J 1998 *Acta Phys. Sin.* **57** 6386 (in Chinese) [朱伟忠、吴衍青、郭智、朱效立、马杰、谢常青、史沛熊、周洪军、霍同林、郇仁忠、徐洪杰 1998 物理学报 **57** 6386]
- [16] Zhu X L, Ma J, Xie C Q, Ye T C, Liu M, Cao L F, Yang J M, Zhang W H 2008 *Acta Optica Sinica* **28** 1026 (in Chinese) [朱效立、马杰、谢常青、叶甜春、刘明、曹磊峰、杨家敏、张文海 2008 光学学报 **28** 1026]
- [17] Liu L H, Liu G, Xiong Y, Huang X L, Chen J, Li W J, Tian J P, Tian Y C 2009 *Optics and Precision Engineering* **17** 72 (in Chinese) [柳龙华、刘刚、熊瑛、黄新龙、陈洁、李文杰、田金萍、田扬超 2009 光学精密工程 **17** 72]
- [18] Schnopper H W, Van Speybroeck L P, Delvaille J P, Epstein A, Kallne E, Bachrach R Z, Dijkstra J, Lantward L 1977 *Appl. Opt.* **16** 1088
- [19] Brauning H, Predehl P, Beuermann K P 1979 *Appl. Opt.* **18** 368
- [20] Yang J M, Yi R Q, Ma H L, Chen Z L, Wang H B, Sun K X, Wen S H, Zhen Z J, Tang D Y, Cui M Q, Li G, Cui C W 1996 *Acta Optica Sinica* **16** 1631 (in Chinese) [杨家敏、易荣清、马洪良、陈正林、王红斌、孙可煦、温树槐、郑志坚、唐道源、崔明启、黎刚、崔聪悟 1996 光学学报 **16** 1631]
- [21] Yang J M, Yi R Q, Chen Z L, Sun K X, Ding Y N, Zhen Z J, Li C G, Cui M Q, Zhu P P, Cui C W 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 613 (in Chinese) [杨家敏、易荣清、陈正林、孙可煦、丁耀南、郑志坚、李朝光、崔明启、朱佩平、崔聪悟 1998 物理学报 **47** 613]
- [22] Yang J M, Ding Y N, Cao L F, Ding Y K, Yang G H, Zhen Z J, Wang Y M, Zhang W H, Cui M Q, Zhu P P, Zhao Y D, Li G 2000 *High Power Laser and Particle Beams* **12** 723 (in Chinese) [杨家敏、丁耀南、曹磊峰、丁永坤、杨国洪、郑志坚、王耀梅、张文海、崔明启、朱佩平、赵屹东、黎刚 2000 强激光与粒子束 **12** 723]
- [23] Born M, Wolf E 1964 *Principles of Optics* (New York: Macmillan) Chap. 8
- [24] <http://www-cxro.lbl.gov/>

# Experimental calibration of transmission grating and theoretical calculation of diffraction efficiency\*

Shang Wan-Li<sup>1)</sup> Zhu Tuo<sup>1)</sup> Xiong Gang<sup>1)</sup> Zhao Yang<sup>1)</sup> Zhang Wen-Hai<sup>1)</sup> Yi Rong-Qing<sup>1)</sup>  
Kuang Long-Yu<sup>1)</sup> Cao Lei-Feng<sup>1)</sup> Gao Yu-Lin<sup>1)</sup> Yang Jia-Min<sup>1)†</sup> Zhao Yi-Dong<sup>2)</sup>  
Cui Ming-Qi<sup>2)</sup> Zheng Lei<sup>2)</sup> Han Yong<sup>2)</sup> Zhou Ke-Jin<sup>2)</sup> Ma Chen-Yan<sup>2)</sup>

1) (*Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

2) (*Institute of High Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

(Received 8 April 2010; revised manuscript received 1 May 2010)

## Abstract

Transmission grating is widely used in measurement of soft X rays. In order to measure the diffraction efficiencies of the transmission grating which is used in laser fusion, the transmission grating was calibrated on Beijing Synchrotron Radiation Facility in the energy region from 200eV to 1600eV, and the experimental results have been obtained. The model for grating efficiency simulation has been developed and calculations using a new so called 7-side quasi-trapezoidal cross section model were carried out. The results from the new model are in good agreement with the experimental data. The exact grating wire cross section is described.

**Keywords:** transmission grating, diffraction efficiency, experimental calibration, grating model

**PACS:** 42.79.Dj, 42.40.Lx, 06.20.fb, 07.85.Jy

---

\* Project supported by the National High Technology Program 863 of China.

† Corredponding Author. E-mail: yjm70018@my-public.sc.cninfo.net