

# 中国科学技术大学

# 博士学位论文



## X 射线光学元件在线波前检测与精密制 造技术研究

作者姓名： 赵帅

学科专业： 仪器科学与技术

导师姓名： 王克逸 教授 Dr. Christian David

完成时间： 二〇二三年九月一日



University of Science and Technology of China  
A dissertation for doctor's degree



**Research on online X-ray optics  
wavefront characterization and  
precision fabrication technology**

Author: Zhao Shuai

Speciality: Instrument Science and Technology

Supervisor: Prof. Keyi Wang Dr. Christian David

Finished time: September 1, 2023



## 中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名: 赵帅

签字日期: 2023.10.31

## 中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权，即：学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

控阅的学位论文在解密后也遵守此规定。

公开  控阅（   年）

作者签名: 赵帅

导师签名: 王支连

签字日期: 2023.10.31

签字日期: 2023.10.31



## 摘要

第四代同步辐射光源 (Synchrotron Radiation, SR) 与 X 射线自由电子激光 (X-ray Free Electron Laser, XFEL) 对光学元件波前形状保持和光束相干性传递提出更高要求，但光学元件在实际工作条件下的面形变化会直接影响传输光束的性能，包括聚焦的质量和相干性保持的程度，因此发展 X 射线波前表征与工作波长下光学元件面形测量技术对光束调控与质量评价等至关重要，是高性能光源先进实验方法和技术发展不可或缺的内容。光栅干涉法由于具有极高的角度灵敏度 (10 nrad 量级)、抗干扰性好、原位与工作波长下无损检测等优点，已经被广泛用于波前传感、工作波长下面形测量和 XFEL 光束质量评价。本文设计、仿真、搭建了实验室级高分辨率 X 射线在线波前检测系统，开展光栅干涉法波前检测技术研究，波前检测角度灵敏度优于 100 nrad。

另一方面，精密 X 射线光学器件对光束的调控包括准直、聚焦、分束等，是开发先进实验站技术及桌面 X 射线仪器的关键。其中 X 射线旋转椭球聚焦镜是一种理想的反射聚焦光学器件，具有无色差、照明对称、易于对准、大 NA (数值孔径)，大带宽和高效率等优点，广泛应用于 X 射线显微镜等系统。桌面级消色差 X 射线显微镜利用集成式消色差 X 射线透镜替代菲涅尔波带片，前者可将复色 X 射线聚焦到同一焦点附近，对于普通 X 光机的复色能谱，消色差透镜成像色差小，光通量更高，更具优势。本文开发 X 射线聚焦光学器件制造技术，结合集成式消色差 X 射线透镜，成功应用于桌面级消色差 X 射线显微镜，空间分辨率优于 200 nm。

本文研究内容主要包括在线 X 射线波前表征和精密 X 射线聚焦光学器件制造技术研究两个部分，主要包括：

1. 建立微焦点 X 射线光栅干涉仪用于波前传感与反射镜面形测量的理论模型，推导出 X 射线反射镜表面斜率误差与干涉条纹相位关系；模拟空间相干性 (光源尺寸)、时间相干性 (光源能谱)、各器件物理参数、传播距离等对干涉条纹可见度、测量角度灵敏度的影响，根据设计参数，模拟 PMMA 小球在 X 射线光栅干涉仪下的相衬成像结果，证明该设计可以获得很好的图像可见度，然后将该参数确定为实验系统参数。

2. 设计并搭建微焦点 X 射线光栅干涉仪实验平台，完成其整体机械设计、加工和安装调试；控制系统电路设计、焊接与装配；图像采集上位机软件编写、调试；监控系统设计与装调，并总结一套 X 射线光栅干涉仪面形测量实验技术。

3. 提出使用反射镜直通光作为参考光束用于相位提取，分别利用相位步进和傅立叶条纹分析技术，重建条纹的相位及波前曲率半径分布，进而计算出波前角

## 摘要

---

度和镜面斜率误差分布，面形测量结果与长程面型仪（Long Trace Profiler, LTP）比对具有很好的一致性，波前检测角度灵敏度优于 100 nrad。

4. 提出一种电磁相位步进方法用于 X 射线反射镜面形测量，使用自制的通电螺线管，通入电流时产生磁场驱动 X 射线光源电子束移动，实现光源点的相位步进，提高了系统稳定性与速度。

5. 研制出金反射面 X 射线旋转椭球聚焦镜。开发了成套 X 射线旋转椭球聚焦镜制造工艺，包括反射镜设计、电镀成型、面形测量、镀膜电铸工艺，脱模工艺等；仿真了集成式消色差 X 射线透镜复色光焦点变化；在 X 光机下测试聚焦镜性能，在直径 100  $\mu\text{m}$  大小的面内，获得 10 倍的光通量提升；将聚焦镜安装在搭建的消色差 X 射线显微镜装置上，获得了优于 200 nm 的空间成像分辨率。

**关键词：**X 射线；波前表征；光栅干涉仪；相位恢复；X 射线聚焦镜

## ABSTRACT

The fourth generation of synchrotron radiation (SR) and X-ray free electron laser (XFEL) demand higher requirements for maintaining the wavefront shape and coherence of optical elements. However, the deformation of optical elements under practical working conditions directly affects the performance of beam transmission, including the quality of focusing and the extent of coherence preservation. Therefore, the development of X-ray wavefront characterization and surface shape measurement techniques for optical elements at the working wavelength is essential for beam manipulation and quality assessment in advanced photon sources. The grating interferometry method, known for its high angular sensitivity (on the order of 10 nrad), excellent anti-interference properties, and non-destructive detection at the working wavelength, has been widely used for wavefront sensing, surface shape measurement at working wavelengths, and XFEL beam quality evaluation. This study designs, simulates, and constructs a laboratory-level high-resolution X-ray online wavefront detection system using grating interferometry, with the wavefront detection angular sensitivity surpassing 100 nrad.

On the other hand, precise X-ray optical elements are crucial for beam manipulation, including collimation, focusing, and beam splitting, which are essential for developing advanced experimental station technologies and desktop X-ray instruments. Among them, the X-ray rotating ellipsoidal mirror is an ideal reflection focusing optical element, characterized by achromatic behavior, symmetrical illumination, easy alignment, large numerical aperture (NA), broad bandwidth, and high efficiency. It finds wide application in X-ray microscopy systems. Desktop achromatic X-ray microscopes utilizing integrated achromatic X-ray lenses instead of Fresnel zone plates can focus polychromatic X-rays to the same focal point. This method reduces chromatic aberrations in imaging for polychromatic X-ray sources and enhances photon flux. This study develops manufacturing techniques for X-ray focusing optical elements and successfully applies them to desktop achromatic X-ray microscopes, achieving spatial resolution better than 200 nm.

The main research of this study includes two parts: online X-ray wavefront characterization and precision X-ray focusing optical element manufacturing technology, mainly encompassing:

1. Establishing a theoretical modeling of microfocus X-ray grating interferometer for wavefront sensing and optical metrology of reflection mirror. The relationship be-

---

## Abstract

---

tween X-ray mirror surface slope error and interference fringe phase is derived. The impacts of spatial coherence (source size), temporal coherence (source energy spectrum), physical parameters of various components, and propagation distance on interference fringe visibility and measurement angle sensitivity are simulated. Based on design parameters, the phase contrast imaging result of PMMA spheres under the X-ray grating interferometer is simulated, demonstrating excellent image visibility, thus confirming these parameters as experimental system parameters.

2. Designing and constructing a micro-focus X-ray grating interferometer experimental platform, completing overall mechanical design, machining, and installation debugging; control system circuit design, welding, and assembly; upper computer software coding and debugging for image acquisition; design and installation of the monitoring system, summarizing a set of X-ray grating interferometry-based surface shape measurement experimental techniques.

3. Proposed a method that use directed beam from a reflection mirror as the reference beam for phase extraction. Phase-stepping and Fourier fringe analysis techniques are utilized to reconstruct the phase and wavefront curvature radius distribution of fringes. This allows calculating the wavefront angle and mirror slope error distribution. The results of surface shape measurement show good consistency with those from a Long Trace Profiler (LTP), with a wavefront detection angular sensitivity surpassing 100 nrad.

4. Proposed an electromagnetic phase-stepping method for optical metrology of X-ray mirror. A custom-made electric coil generates a magnetic field that drives the electron beam of the X-ray source to move, achieving phase stepping of the light source and improving system stability and speed.

5. Developing a gold-coated X-ray rotating ellipsoidal mirror. A complete fabrication process is developed for the X-ray ellipsoidal mirror, including mirror design, electroplating, surface shape measurement, coating resist, deposite gold and mold releasing. Simulated the focal length of achromatic lens in different energy. The performance of the focusing mirror is tested by an X-ray tube, achieving a 10-fold increase in photon intensity within a 100  $\mu\text{m}$ -diameter area. The focusing mirror is then installed in the desktop achromatic X-ray microscope setup, achieving imaging spatial resolution better than 200 nm.

**Key Words:** X-ray; wavefront characterization; grating interferometer; phase retrieval; X-ray focusing mirror

## 目 录

第 1 章 绪论 ······	1
1.1 X 射线光源 ······	2
1.1.1 X 射线管 ······	2
1.1.2 同步辐射光源 ······	4
1.1.3 激光等离子体 ······	5
1.1.4 X 射线自由电子激光 ······	5
1.2 X 射线相干性 ······	7
1.2.1 时间相干性 ······	8
1.2.2 空间相干性 ······	9
1.3 X 射线与物质相互作用 ······	11
1.4 波前传播理论 ······	13
1.4.1 直角坐标系的惠更斯-Fresnel 原理 ······	13
1.4.2 Fresnel 近似 ······	14
1.4.3 离散化 Fresnel 方程 ······	14
1.4.4 基于传递函数的菲涅耳传播 ······	16
1.4.5 夫琅和费衍射 ······	17
1.5 X 射线波前表征 ······	18
1.5.1 X 射线波前表征技术简介 ······	18
1.5.2 本文的研究内容与意义 ······	21
1.6 小结 ······	23
第 2 章 X 射线光栅干涉仪 ······	25
2.1 工作原理简介 ······	25
2.2 Talbot 效应 ······	26
2.2.1 整数 Talbot 自成像效应 ······	26
2.2.2 分数 Talbot 自成像效应 ······	28
2.2.3 球面波照明 ······	31
2.2.4 光栅衍射效率 ······	32
2.3 模拟部分相干光照明对光栅干涉仪影响 ······	35
2.3.1 时间相干性分析 ······	35
2.3.2 空间相干性分析 ······	36
2.4 PMMA 小球相衬成像模拟 ······	40

## 目 录

---

2.5 微焦点 X 射线光栅干涉仪的波前传感与面形测量原理 ······	43
2.6 小结 ······	44
<b>第 3 章 光栅干涉仪平台搭建与实验技术 ······</b>	<b>46</b>
3.1 系统简介 ······	46
3.1.1 机械系统设计 ······	46
3.1.2 光学器件与探测器 ······	46
3.1.3 控制系统设计 ······	48
3.1.4 相位步进压电平移台 ······	50
3.2 系统设计 ······	51
3.2.1 关键参数 ······	51
3.2.2 角度灵敏度 ······	51
3.3 系统校准 ······	52
3.3.1 器件中心对准 ······	52
3.3.2 光栅对准 ······	52
3.3.3 探测器校准 ······	54
3.4 小结 ······	54
<b>第 4 章 光栅干涉仪波前表征实验方法 ······</b>	<b>55</b>
4.1 Moiré 分析方法 ······	55
4.1.1 Moiré 效应 ······	55
4.1.2 面形测量与波前表征 ······	56
4.2 机械式相位步进 ······	59
4.2.1 相位步进测量 ······	59
4.2.2 两种模式对比 ······	61
4.2.3 测量空间分辨率 ······	61
4.3 电磁相位步进 ······	62
4.4 小结 ······	65
<b>第 5 章 消色差 X 射线显微镜聚光器研制 ······</b>	<b>66</b>
5.1 X 射线显微镜简介 ······	66
5.1.1 透射 X 射线显微镜原理 ······	66
5.1.2 透射式 X 射线显微镜应用与研发难点 ······	68
5.2 桌面级消色差 X 射线显微镜 ······	68
5.2.1 消色差 X 射线显微镜原理 ······	69
5.2.2 消色差 X 射线透镜简介 ······	70
5.2.3 集成式 X 射线消色差透镜模拟 ······	72

## 目 录

---

5.3 X 射线旋转椭球聚焦镜设计 ······	74
5.3.1 聚焦原理 ······	75
5.3.2 几何设计 ······	76
5.4 X 射线旋转椭球聚焦镜制造 ······	77
5.4.1 工艺流程 ······	78
5.4.2 电镀成型 ······	79
5.4.3 面形测量 ······	81
5.4.4 热蒸发旋转镀膜 ······	83
5.5 桌面 X 光机测试聚焦镜 ······	85
5.6 消色差 X 射线显微镜成像实验 ······	88
5.7 小结 ······	88
第 6 章 总结与展望 ······	90
6.1 论文主要研究工作总结 ······	90
6.2 研究内容展望 ······	91
参考文献 ······	93
致谢 ······	104
在读期间发表的学术论文与取得的研究成果 ······	106



# 第1章 绪论

X射线的波长范围约在0.01-10 nm之间，如图1.1所示，波长小于0.1 nm的叫做硬X射线，波长略大者被称作软X射线。X射线在与物质相互作用时呈现干涉、衍射以及偏振等现象，也表明了光的波动性质；康普顿散射实验说明X射线也具备粒子特性。

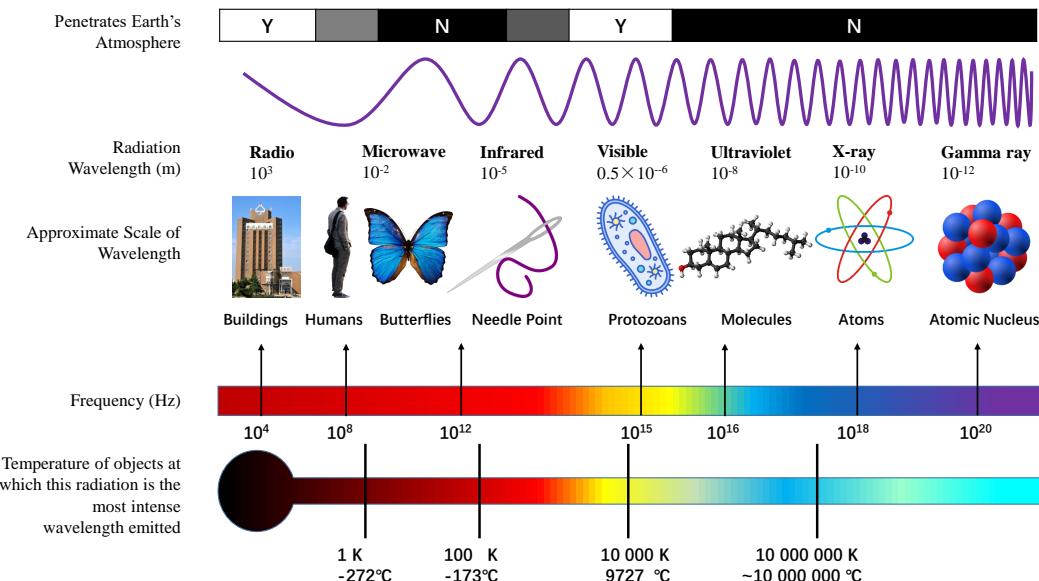


图 1.1 电磁波的波谱与性质

X射线的光子能量可以表示为： $E = hv = hc/\lambda$ 。其中  $h$  是普朗克常数 (Planck Constant):  $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1}$ ,  $c$  是光速,  $\lambda$  是波长。因此, X射线波长与光子能量有如下简单的计算公式:

$$E[\text{keV}] = \frac{12.398}{\lambda[\text{\AA}]} \cong \frac{12.4}{\lambda[\text{\AA}]} , \quad (1.1)$$

其中,  $1\text{\AA} = 0.1 \text{ nm}$ 。由式1.1可知, 波长0.1 nm的X射线能量是12.4 keV。

单色线偏振平面波沿着波矢  $k$  方向传播时, 角频率  $\omega = c \cdot k$ , 波的电场  $E$  和磁场  $H$  相互垂直并垂直于波矢  $k$  方向, 为简单起见, 通常只考虑电场  $E$ , 此时电磁波可以表达成如下形式:

$$E(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{i(k \cdot \mathbf{r} - \omega t)} . \quad (1.2)$$

19世纪Wilhelm Conrad Roentgen发现X射线以来, X射线作为不可替代的探测物质结构的探针, 具有两个方面的独特优势: 一方面是X射线穿透力极强, 另一方面在于X射线的波长极短, 可以克服光学衍射极限, 解析原子级物质结构。X射线的特性及其与物质相互作用的研究已广泛用于生命科学、材料科学和地球科学等不同科学和工业领域, 如图1.2所示<sup>[1][2]</sup>。

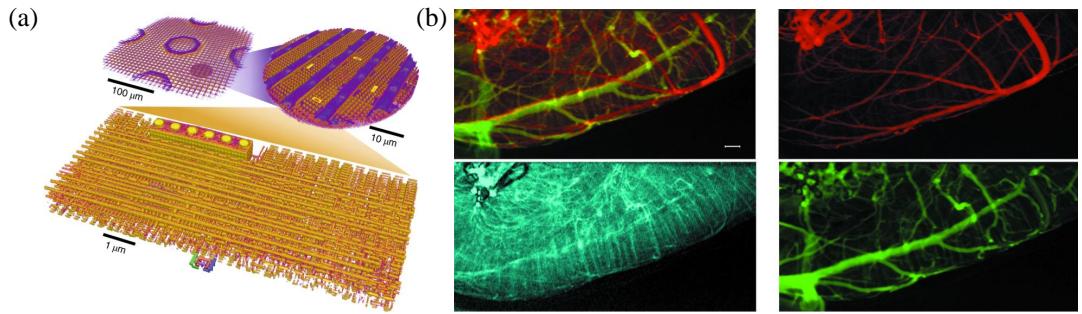


图 1.2 X 射线的应用。(a) 利用 X 射线显微镜以 18.9 nm 分辨率重建 Apple A12 Bionic 芯片, (b) 运动衬度 X 射线成像实现动、静脉微血管分离成像。

## 1.1 X 射线光源

在全球范围内, 已经发展出多种产生 X 射线的方法, 主要包括: 利用 X 射线管、激光等离子体技术、同步辐射装置以及 X 射线激光器。

### 1.1.1 X 射线管

X 射线管在真空中将输入电能转换为 X 射线光子。X 射线管工作原理如图1.3(a) 所示。

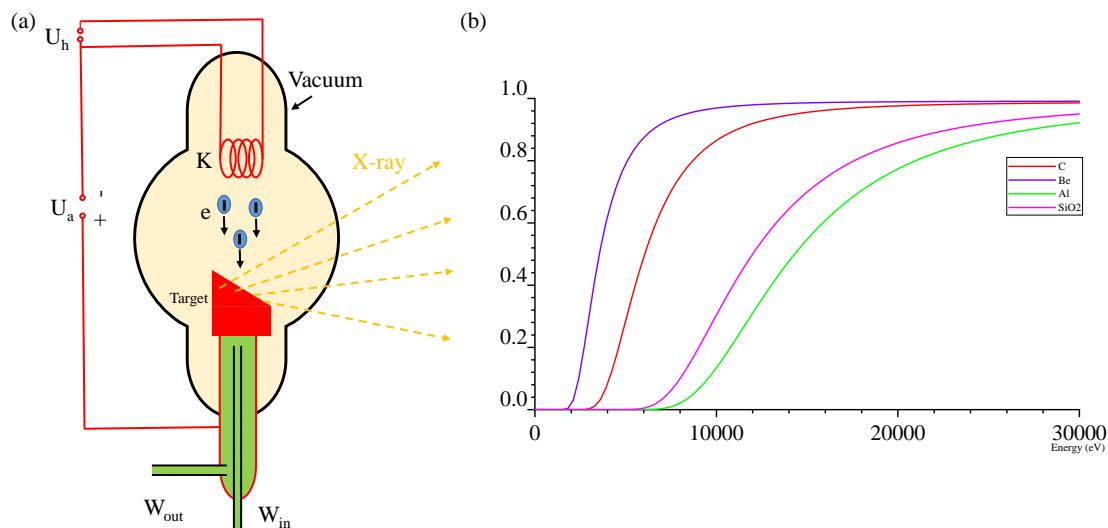


图 1.3 X 射线管介绍。(a) X 射线光管工作原理, (b) 不同材料 300  $\mu\text{m}$  厚度时的 X 射线透过率。

被加热的灯丝通过热电子发射释放电子, 电子在高压电场中加速与阳极靶材碰撞, 高能电子与原子核外电子相互作用产生 X 射线光子。X 射线穿过材料的透过率与材料种类、厚度、光子能量有关等, X 射线能量与物质厚度一定的情况下, 铍的透过率最高, 如图1.3(b), 这种优异的透射特性使得许多 X 射线源选择采用铍窗, 以实现更高效的 X 射线利用。当然, 在特定应用场景下, 需要从 X 射线中分离出高能或者低能部分。这时, 科学家可以选择不同过滤材料, 如铝、

铜、镍等，以实现低能X射线的过滤与分离。

从冷却的阳极产生和发射的X射线有两种类型：特征辐射与韧致辐射。光谱中的连续辐射是由于电子与阳极材料发生碰撞后减速产生的韧致辐射效应所致。此外，高速电子撞击靶材击出离原子核较近的电子，形成自由电子。这一过程使得内层轨道产生临时的电子空位，然后又被外层电子填充，如图1.4(a)所示。当外层轨道电子内层跃迁时，会产生X射线，其能量就等于这两个轨道能级之差，并且仅取决于靶材料本身的特征，图1.4(b)为钨靶X射线谱。

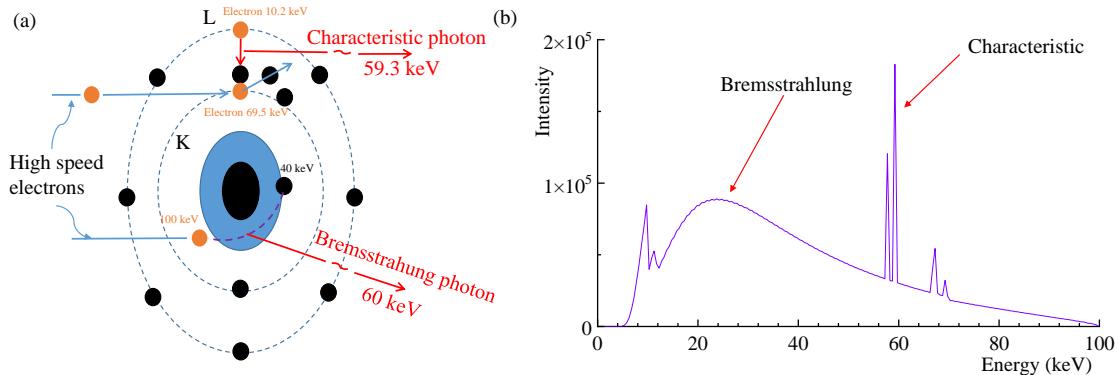


图1.4 X射线管的发光特性。(a) 原子中特征辐射与韧致辐射产生原理，(b) 钨靶X射线管的发射光谱。

X射线束的质量评价取决于几个方面，虽然产生高强度通常很重要，但对于许多应用来说，相关的品质因数是源的亮度  $B$ 。这个值结合了所有影响因素，并使得不同X射线光束可以相互对比。 $B$  被定义为<sup>[3-4]</sup>：

$$B = \frac{F}{4\pi^2 \epsilon_x \epsilon_y} , \quad (1.3)$$

式中： $F$  代表带宽  $\Delta\lambda/\lambda = 0.1\%$  时的光子通量（每秒的光子数）。光束发射度  $\epsilon$  是光源尺寸 ( $\text{mm}^2$ ) 均方根 (root-mean square, RMS) 和光源发散度 ( $\text{mrad}^2$ ) RMS 的乘积，水平和垂直方向上的发射度分别表示为  $\epsilon_x$  和  $\epsilon_y$ 。

该公式可用于判断光源质量， $B$  越大代表光源质量越高。例如，高通量（每秒光子数）光源可以减少数据采集时间并支持开展动态实验，小光源尺寸可提高成像系统的空间分辨率，而将发射的光子集中到一个立体角中，可以降低光源发散度，提高恒定通量下的空间相干性，或增加恒定空间相干性下的光通量。该亮度的表达式是相对带宽在 0.1 % 时的计算公式，许多实验需要更窄带宽、单色性好的光束，这会降低光通量。

X射线管的发光强度低（避免靶材融化），相干性差，液态金属靶X光机的出现虽然将亮度提高了1-3个数量级，但是依然无法满足高时间、高空间和高能量分辨率以及高效率的实验需求，随着同步辐射光源等大科学装置的出现，X射线对科学的推动也上了一个新的台阶。

### 1.1.2 同步辐射光源

同步辐射光源亮度高、覆盖从远红外至X射线波段，并能连续可调。1947年，人们首次在电子同步加速器上发现，当电子做环形运动时，在其切线方向会产生电磁辐射，因此得名为“同步辐射”。相较于常规X射线，其波长可以覆盖红外、可见光、紫外和X射线波段，通过在光束线上安装准直、聚焦、分束器、单色器等一系列光学器件，可以选取不同能量且具有高时间相干性的光进行实验。电子在加速器中是离散化团状分布，因此产生的同步辐射光是不连续的脉冲光，因此其可用于时间分辨实验。此外，同步辐射光具有低发散度，第四代衍射极限同步辐射光源甚至可以将发散度做到prad量级，其空间分辨率和能量利用率均能显著提高。同步辐射的亮度也非常高，最高可比常规X射线源15-20个量级，可以用于超快动态观察实验。

总的来说，同步辐射光源可以为各种实验提供纳米级空间分辨、皮秒级时间分辨和毫电子伏特能量分辨，覆盖原子、电子、声子和磁性等实验，并可在多种特殊条件下进行高效率和高精度实验，包含超高/低温，强电压、强磁/电场、真空中以及高腐蚀。

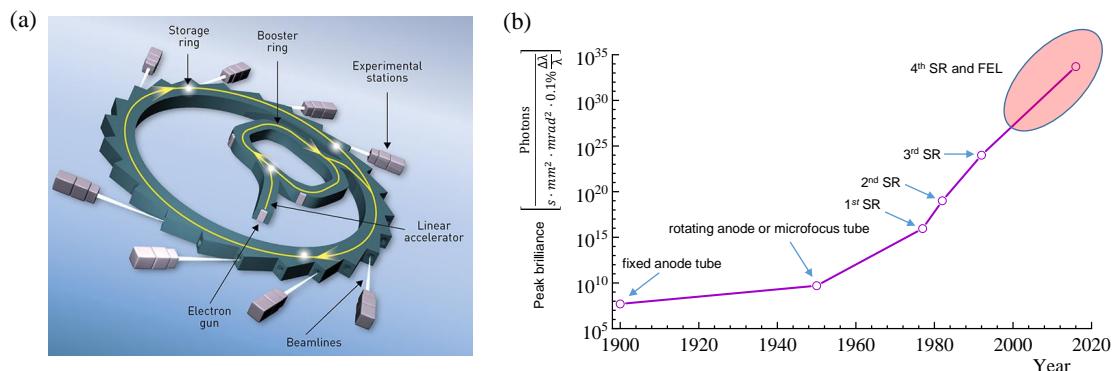


图 1.5 同步辐射光源。(a) 同步辐射光源结构原理图, (b) 几代同步辐射光源峰值亮度对比。

目前世界上已经为用户提供服务的同步辐射光源有50多台，中国目前已经建成运行的包括台湾新竹的台湾光源和台湾光子源，位于上海浦东的上海光源，这三座均为三代光源；还有两座是合肥光源和北京同步辐射装置，这两座光源分别为二代和一代光源。目前北京和合肥都已经开建第四代同步辐射光源，分别是位于北京市怀柔区的(HEPS)和合肥先进光源(HALF)。

### 1.1.3 激光等离子体

激光等离子体产生 X 射线原理如图1.6所示，TW 级激光脉冲（红色）聚焦到气室中打在等离子体气体靶上，等离子波在气室中将电子加速到数百兆电子伏特的能量，电子束由透镜准直。等离子辐射和激光束被铝箔阻挡，电子则通过波荡器传播，并沿正向（蓝色）将 X 射线辐射到一个狭窄的圆锥体中。辐射由球形金镜收集，并由透射光栅与 X 射线 CCD 相机相结合进行表征。杂散光被光栅前面的狭缝阻挡，电子束的指向、发散和光谱由荧光屏诊断。其泵浦激光器包含有 Nd:YAG，钕玻璃和 KrF 三种类型。

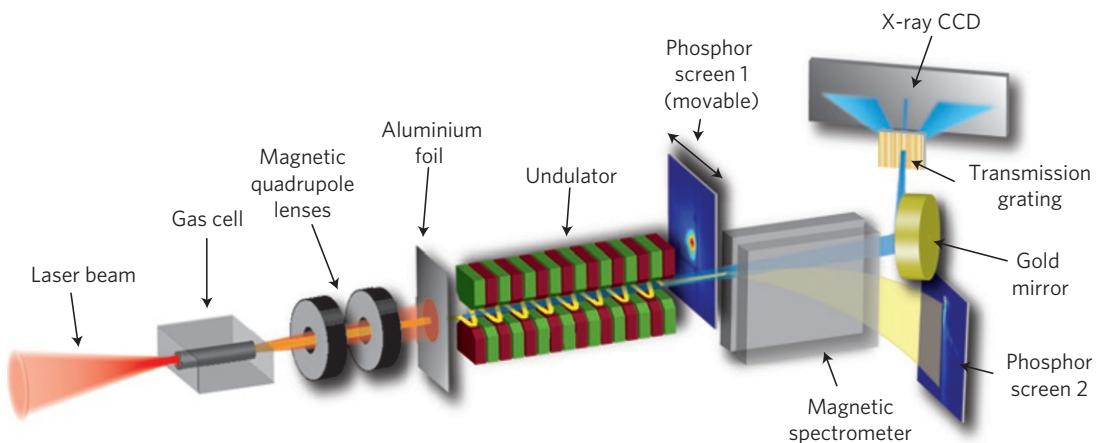


图 1.6 激光等离子体 X 射线光源原理<sup>[5]</sup>。

### 1.1.4 X 射线自由电子激光

1971 年，物理学家 John Madey 首次发现相对论性自由电子与光相互作用产生相干放大辐射，这种现象后来被称为自由电子激光效应。

在 FEL 被提出之后的数年间，全球各地建立了不同波长的 FEL 装置。这些装置可以产生高质量激光光束，具有高度的相干性和调谐性，FEL 可发出波长  $10^{-2}$  nm 至  $10^3$  nm 的激光，适用于材料研究、生命科学、医学成像、高能物理等领域。<sup>[6-7]</sup>

XFEL 的亮度比三代 SR 高出 10 个数量级以上，可达到  $10^{20}$  W/cm<sup>2</sup>，脉冲长度短一万倍，可达到阿秒级，产生相干 X 射线。XFEL 的超强超短脉冲可提供原子尺度空间分辨率，飞秒级原子核运动时间，百阿秒级价电子运动时间<sup>[6]</sup>。因此，XFEL 可为研究化学键断裂、光致原子运动、辐射损伤反应通道等科学问题提供强有力的解析工具。

如图1.7(a) 为位于德国汉堡的 3.4 公里长的欧洲自由电子激光，在直线加速器中，电子由磁铁引导，并产生 X 射线激光。

直线加速器将电子束加速至接近光速。这个相对论电子束位于一系列磁体

排列所形成的横向磁场中振荡，如图1.7(b) 和 (c) 所示，在电子束运动的切线方向上，会产生自发辐射，自发辐射持续地与相对论电子束发生相互作用、放大自发辐射实现正反馈放大，直到系统达到饱和状态<sup>[6]</sup>。这就是自由电子激光 (FEL) 的基本工作原理。

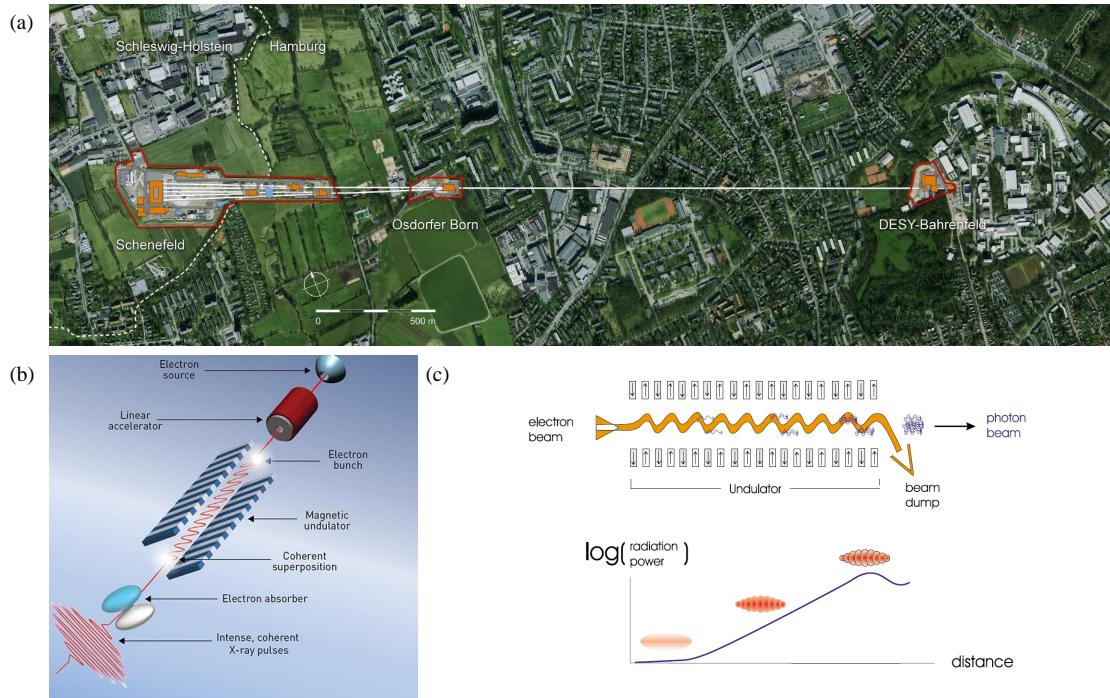


图 1.7 X 射线自由电子激光。(a) 德国汉堡的 European XFEL 卫星图, (b)XFEL 装置的原理图, (c) 电子束在波荡器中通过 SASE 模式产生 FEL。

## 1.2 X 射线相干性

相干性是指两个不同点的波场在空间或时间上的相关性。在进行 X 射线成像和测量时，经常利用光束的相干性从非吸收性物体中产生高对比度的干涉图案。在相干光束中，例如单色平面波或者从理想点光源发出的单色球面波，波前的任何两个点之间存在恒定的相位关系。

部分相干性意味着 X 射线不是完全相干的，即来自 X 射线源的光并不是单色的，没有完全的纵向相干性或时间相干性；X 射线源也不是理想点源，具有一定的空间尺度，即没有完全的横向相干性，也叫空间相干性。

部分相干光理论用于描述一个多色拓展光源产生光场的统计性质，利用统计光学的方法研究并处理光场的部分相干现象<sup>[8-10]</sup>。统计光学中采用相干函数来描述光场的相干性。一个光场  $\tilde{u}(P, t)$  的  $n + m$  阶相关函数定义为<sup>[8,10]</sup>：

$$\begin{aligned}\tilde{I}_{1,2,\dots,n+m}(t_1, t_2, \dots, t_{n+m}) &= \langle \tilde{u}(P_1, t_1) \cdots \tilde{u}(P_n, t_n) \tilde{u}^*(P_{n+1}, t_{n+1}) \cdots \tilde{u}^*(P_{n+m}, t_{n+m}) \rangle \\ &= \left\langle \prod_{j=1}^n \tilde{u}(P_j, t_j) \prod_{k=n+1}^{n+m} \tilde{u}^*(P_k, t_k) \right\rangle,\end{aligned}\quad (1.4)$$

这是描述  $n + m$  个时空点之间的光场的关联情况的函数，其中  $\langle \dots \rangle$  表示时间平均值， $*$  表示复共轭。我们已经假定各个时空点的光场具有相同的偏振态而没有给出偏振态下标。对于我们通常涉及的各态历经随机过程，可把时间平均换成对应的系综平均。当  $n = m$  时，相干函数成为  $2n$  阶相关函数

$$\begin{aligned}\tilde{I}_{1,2,\dots,n+m}(t_1, t_2, \dots, t_{2n}) &= \langle \tilde{u}(P_1, t_1) \cdots \tilde{u}(P_n, t_n) \tilde{u}^*(P_{n+1}, t_{n+1}) \cdots \tilde{u}^*(P_{2n}, t_{2n}) \rangle \\ &= \left\langle \prod_{j=1}^n \tilde{u}(P_j, t_j) \prod_{k=n+1}^{2n} \tilde{u}^*(P_k, t_k) \right\rangle,\end{aligned}\quad (1.5)$$

而当  $n = 1$  时，则得二阶相关函数

$$\tilde{I}_{12}(t_1, t_2) \equiv \langle \tilde{u}(P_1, t_1) \tilde{u}^*(P_2, t_2) \rangle. \quad (1.6)$$

令  $t_1 - t_2 = \tau$ ，则有：

$$\tilde{I}_{12}(\tau) \equiv \langle \tilde{u}(P_1, t + \tau) \tilde{u}^*(P_2, t) \rangle. \quad (1.7)$$

两个复杂光场之间统计关系用上述函数表示，称为互相干函数，或称交叉相干函数。

如果只考虑一个空间点，两个时间点的光场之间的关联情况，则得到自相干函数

$$\tilde{I}(\tau) = \langle \tilde{u}(t + \tau) \tilde{u}^*(t) \rangle. \quad (1.8)$$

### 1.2.1 时间相干性

时间相干性，也叫纵向相干性，描述的是沿传播方向不同点处光波相位的相关性，反映光的单色性。使用非单色光时观察到的强度分布可以视为单色波根据其强度加权的非相干叠加。当所有光的波前具有相同相位时，产生的干涉条纹可见度最高；当波之间相位差变大时，干涉条纹可见度降低，最后在相位相反处消失。 $\tilde{u}(t)$  表示光源发出的光的解析信号， $\tilde{u}(t)$  与相对时移  $\tau$  的自己波  $\tilde{u}(t + \tau)$ ，两者之间的自相干函数被称为光扰动的自相干函数：

$$\tilde{\Gamma}(\tau) = \langle \tilde{u}(t + \tau) \tilde{u}^*(t) \rangle . \quad (1.9)$$

归一化后的自相干函数如下：

$$\tilde{\gamma}(\tau) = \frac{\tilde{\Gamma}(\tau)}{\tilde{\Gamma}(0)} \quad (1.10)$$

$\tilde{\gamma}(\tau)$  称为光的复相干度，具有以下性质：

$$\tilde{\gamma}(0) = 1 , \quad |\tilde{\gamma}(\tau)| \leq 1 . \quad (1.11)$$

干涉条纹的可见度定义如下：

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} , \quad (1.12)$$

其用于计量干涉图样的明暗条纹的清晰程度，其中  $I_{\max}$ ,  $I_{\min}$  分别为干涉图样的最大强度与最小强度。干涉可见度的范围在 0 到 1 之间。假设两个波的振幅相等，则干涉条纹可见度等于相干度的模<sup>[10-11]</sup>：

$$V = |\tilde{\gamma}(\tau)| . \quad (1.13)$$

光源的功率谱密度函数与自相关函数满足如下关系<sup>[10]</sup>：

$$\tilde{\Gamma}(\tau) = \int_0^\infty 4G^{(r,r)}(\nu) e^{-j2\pi\nu\tau} d\nu , \quad (1.14)$$

$G^{(r,r)}(\nu)$  是实值光扰动  $u^{(r)}(t)$  的功率谱密度。由上式可以看出，二者关系之间正是一对傅立叶变换对。同时也可利用功率谱密度  $G^{(r,r)}(\nu)$  表示相干度：

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}(\tau) &= \frac{\int_0^\infty 4G^{(r,r)}(\nu) e^{-j2\pi\nu\tau} d\nu}{\int_0^\infty 4G^{(r,r)}(\nu) d\nu} \\ &= \int_0^\infty \hat{G}(\nu) e^{-j2\pi\nu\tau} d\nu , \end{aligned} \quad (1.15)$$

$\hat{G}(\nu)$  是归一化的功率谱密度。从式1.15我们可以计算由不同功率谱密度形状的光源对应的复相干度分布曲线。

借助于复相干度可以对相干时间作出确切定义，定义扰动  $\tilde{u}(t)$  的相干时间为：

$$\tau_c = \int_0^\infty |\tilde{\gamma}(\tau)|^2 d\tau. \quad (1.16)$$

相干长度  $L_c$  定义为在相干时间  $\tau_c$  时间内，波所能传播的距离，又称为纵向相干长度。对于高斯线型的功率谱分布，相干时间为

$$\tau_c = \sqrt{\frac{2 \ln 2}{\pi}} \cdot \frac{1}{\Delta\nu} = \frac{0.664}{\Delta\nu}. \quad (1.17)$$

因此相干长度为

$$L_c = \tau_c \cdot c = \frac{0.664\lambda^2}{\Delta\lambda}. \quad (1.18)$$

同步辐射光束线使用单色器选择窄能量波段的 X 射线，可得到高于波荡器的能量分辨率。在 10-20 keV 范围内，纵向相干长度可达 1- 10 μm ( $\Delta E/E \approx 10^{-4} - 10^{-5}$ )。

## 1.2.2 空间相干性

在讨论时间相干性时，我们假定光源是一个严格的点源。但实际上任何一个真实的光源都有一定的尺寸（线度），自然要考虑这个有限的大小，这样就提出了空间相干性的问题。

空间相干性表示位于点  $P_1$ 、 $P_2$  的两个波扰，经过时间平均后，彼此相互干涉的能力。实际上空间相干性，是两个波扰不考虑延迟时间因素后的互相关函数。考虑单色波照明下，距离为 z 的平面内两点  $P_1$  和  $P_2$  处波的相互强度来自源的定义是

$$\tilde{I}_{12}(P_1, P_2) = \langle \tilde{u}(P_1) \tilde{u}^*(P_2) \rangle, \quad (1.19)$$

当  $P_1=P_2$  时，互强度就等于观察到的光强分布  $I(P_1) = |\tilde{u}(P_1)|^2$ 。复相干度定义为归一化的互相干函数  $\tilde{\gamma}_{12}(P_1, P_2)$

$$\tilde{\gamma}_{12}(P_1, P_2) = \frac{\tilde{I}_{12}(P_1, P_2)}{[\tilde{I}_{11}(P_1, P_1) \tilde{I}_{22}(P_2, P_2)]^{1/2}}, \quad (1.20)$$

其中  $\tilde{I}_{11}(P_1, P_1)$  和  $\tilde{I}_{22}(P_2, P_2)$  是点  $P_1$  和  $P_2$  上的光强度。当  $P_1$  与  $P_2$  位置相同时， $\tilde{\gamma}_{12}(P_1, P_2)=1$ ，此时两列波原点相同。

1941 年提出的范希特—泽尼克 (van Cittert-Zernike) 定理是光学中预测扩展部分相干光源的相干度传播的一个标准定理<sup>[10]</sup>，数学上自由空间互强度传播公

式表示为

$$\tilde{J}(x_1, y_1; x_2, y_2) = \frac{ke^{-j\varphi}}{(\bar{\lambda}z)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} I(\alpha, \beta) \exp \left[ j \frac{2\pi}{\bar{\lambda}z} (\Delta x \alpha + \Delta y \beta) \right] d\alpha d\beta, \quad (1.21)$$

其中  $I(\alpha, \beta)$  是光源的强度分布,  $\Delta x = x_2 - x_1$ ,  $\Delta y = y_2 - y_1$ ,

$$\varphi = \frac{\pi [(x_1^2 + y_1^2) - (x_2^2 + y_2^2)]}{\bar{\lambda}z}. \quad (1.22)$$

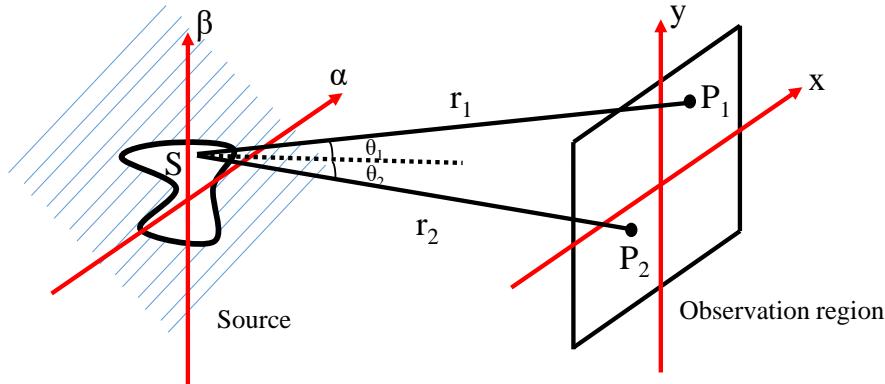


图 1.8 范希特—泽尼克定理的几何关系

令  $x_1 = x_2$ ,  $y_1 = y_2$ ,  $P_1$  和  $P_2$  点的光强相等, 由范希特—泽尼克定理

$$I(x_1, y_1) = I(x_2, y_2) = \frac{1}{(\bar{\lambda}z)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} I(\alpha, \beta) d\alpha d\beta. \quad (1.23)$$

于是复相干度可以表示为:

$$\begin{aligned} \gamma(x_1, y_1; x_2, y_2) &= \frac{J(x_1, y_1; x_2, y_2)}{[I(x_1, y_1) I(x_2, y_2)]^{1/2}} \\ &= \frac{e^{-j\varphi} \iint_{-\infty}^{\infty} I(\alpha, \beta) \exp \left[ j \frac{2\pi}{\bar{\lambda}z} (\Delta x \alpha + \Delta y \beta) \right] d\alpha d\beta}{\iint_{-\infty}^{\infty} I(\alpha, \beta) d\alpha d\beta}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

在近轴近似下, 观察屏两点之间的复相干度, 与光源强度分布函数归一化傅立叶变换正比。从该定理可以看出, 空间相干长度可以在自由空间传播时得到改善, 因此同步加速器等大科学装置上长光束线可以增加空间光源的相干长度。

横向相干长度  $\Lambda_c$  一般被定义为两点间复相干度的模  $|\gamma|=1/2$  时,  $(P_1, P_2)$  两点间的距离<sup>[12]</sup>。由式1.24可得到, 在距离光源  $z$  处,  $\Lambda_c$  可以尺寸  $\Omega$  的函数<sup>[13]</sup>

$$\Lambda_c = \frac{\lambda z}{2\pi\sigma_x}, \quad (1.25)$$

其中  $z$  代表距离光源的长度, 光源强度分布满足高斯分布  $\exp(-x^2/2\sigma_x^2)$ ,  $\sigma_x$  为光源沿  $x$  方向分布的标准差, 光源半高宽 (Full Width at Half Maximum, FWHM)  $\Omega$  与  $\sigma_x$  的关系为:

$$\Omega = 2\sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma_x \approx 2.355 \cdot \sigma_x \circ \quad (1.26)$$

### 1.3 X 射线与物质相互作用

X 射线与物质相互作用时, 也具有反射、折射、散射、干涉、衍射、偏振和吸收等现象。其复场函数可以表示为<sup>[12]</sup>

$$u(x, y, z, t) = u_0(x, y, z) e^{i\omega t} e^{i\phi(x, y, z)}, \quad (1.27)$$

其由四个参数定义, 幅值  $u_0$ , 频率  $\omega/2\pi$ , 相位  $\phi$  和偏振<sup>[14]</sup>。在 X 射线成像和计量中, 振幅和相位是经常用到的两个参数。

X 射线传播过程中波振幅减小的原因称为吸收, 而其相位的变化称为相移。X 射线穿过物质时的复折射率为

$$n_\lambda(x, y, z) = 1 - \delta_\omega(x, y, z) + i\beta_\omega(x, y, z), \quad (1.28)$$

其中  $\delta$  和  $\beta$  是实数, 分别表示 X 射线穿过物质时的衰减和相移。由于 X 射线与物质之间的作用非常小, 因此折射率  $n$  非常接近于 1。因此, X 射线在材料中沿 Z 方向, 由位置  $z_1$  到  $z_2$  的传播遵循以下等式

$$\begin{aligned} u_2(x, y, z_2) &= u_1(x, y, z_1) e^{i\frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} n_\omega(x, y, z) dz} \\ &= u(x, y, 0) e^{i\frac{2\pi}{\lambda} e^{-i\frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} \delta dz} e^{-\frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} \beta dz}}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

由于 X 射线探测器只能探测到光强度  $I$  的变化, 即振幅的平方。X 射线在物质中传播距离  $z$  后的衰减定义为

$$A_{bs}(x, y, z) = \frac{I_2(x, y, z_2)}{I_1(x, y, z_1)} = \frac{|u_2(x, y, z_2)|^2}{|u_1(x, y, z_1)|^2} = e^{-\frac{4\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} \beta dz}. \quad (1.30)$$

定义  $\mu$  为 X 射线线吸收系数。当 X 射线穿过厚度为  $|z_2 - z_1|$  的均匀物体时,  $I_2(x, y, z_2) = I_1(x, y, z_1) e^{-\mu|z_2 - z_1|}$ , 根据等式 1.30 可知, 线吸收系数  $\mu = 4\pi\beta/\lambda$ 。

X 射线发生的相移为:

$$\begin{aligned} \Delta\phi(x, y, z_2 - z_1) &= \arg(u_2) - \arg(u_1) \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} n_{matter} dz - \frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} n_{air} dz \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \int_{z_1}^{z_2} \delta_\omega(x, y, z) dz. \end{aligned} \quad (1.31)$$

空气中 X 射线折射率  $n_{air} \approx 1$ , 特定材料中折射率为  $n_{matter} = 1 - \delta_\omega(x, y, z)$ ,  $\arg()$  表示复数的幅角值。根据1.29, 1.30和1.31, 可以将 X 射线穿过厚度为  $z$  的材料的透过率函数定义为

$$T(x, y, z) = (A_{bs})^{\frac{1}{2}} e^{(-i\Delta\phi)} = \exp\left(\int_0^z -\left(\frac{\mu}{2} + i\frac{2\pi\delta}{\lambda}\right) dz\right)。 \quad (1.32)$$

X 射线探测器只能探测到光强度  $I$  的变化, 不能直接探测到相位移动, 但是可以通过测量 X 射线的折射角  $\alpha$  去恢复相移, 即通过测量相位的一阶导数, 再积分求得相位分布。关于波前探测的原理将在下一章详细介绍。

如图1.9, 当一束平面 X 射线波穿过沿 X 方向分布的楔形物体时, 光束折射路径长度分布可以表达为  $\Delta z(x) = x \cdot \tan\gamma$ , 其中  $\gamma$  是楔形的张角。根据公式1.31计算相位移动再求导可以得到波前折射角为  $\alpha_y = \delta \cdot \tan\gamma$ 。当波长小于 1 nm 的硬 X 射线穿过物体时, 相位因子  $\delta$  在  $10^{-6}$  量级, 因此, 波前角度探测的典型值一般在  $\mu\text{rad}$  量级。

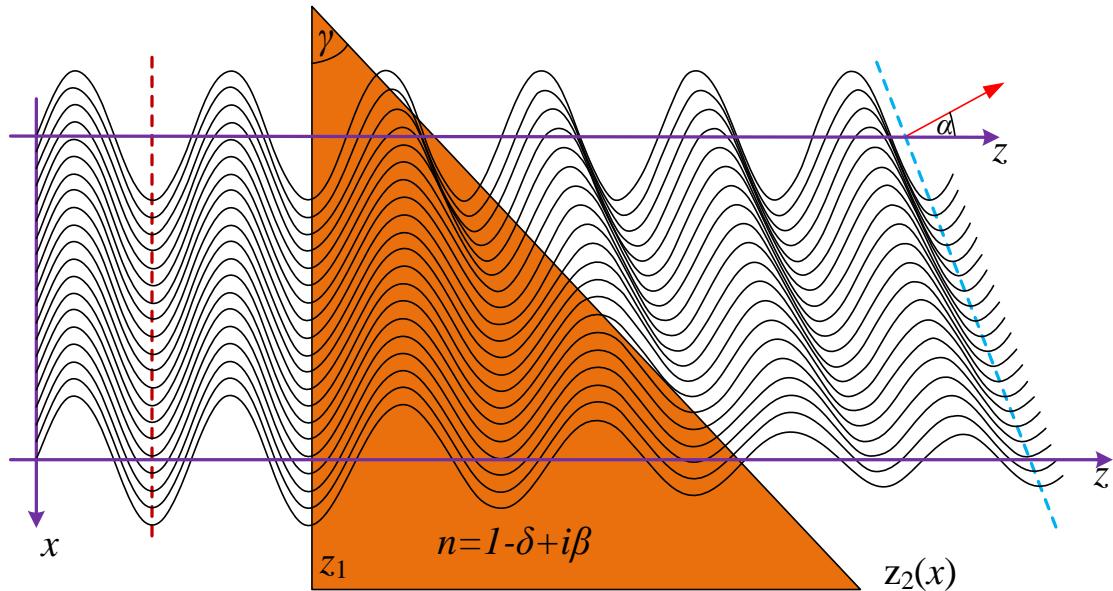


图 1.9 平面波前被楔形物体折射图

## 1.4 波前传播理论

衍射在处理波传播的物理或工程科学分支中起着极其重要的作用，标量衍射理论可用于处理声波和无线电波传播，本文主要关注其在物理光学领域的应用。X射线作为电磁波，也可以用标量衍射理论的去处理X射线光束波前传播问题。关于标量衍射理论的基础，本文不再赘述，读者可以参考信息光学<sup>[15]</sup>或者Goodman的傅立叶光学<sup>[16]</sup>。

对于非相干X射线，如在X射线管或同步加速器源处的弯曲磁铁或扭摆器上发出的光，可以通过基于几何光学近似的光线追迹方法进行很好的模拟，例如SHADOW等。然而，对于同步加速器波荡器和自由电子激光光束线上的相干辐射，需要波动光学方法进行模拟，自由电子激光可以提供与光束大小相当的空间相干长度，基于波动光学的模拟方法对其更加重要<sup>[8]</sup>。本节将介绍远场和近场波前传播理论，并给出近场自由空间X射线波前传播方程，再给出用于计算机数值模拟的离散化方程。

光在自由空间传播时一般考虑两种传播方式：近场或菲涅耳方式和远场或夫琅和费方式。

### 1.4.1 直角坐标系的惠更斯-Fresnel原理

惠更斯—菲涅耳原理(Huygens–Fresnel principle)指出，波前的每一点发出次波，这些次波互相干涉，叠加形成新的波前。计算某一波面 $\Sigma$ ，在观察点 $P_1$ 产生的复振幅 $U(P_1)$ 时

$$U(P_1) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U(P_0) \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \cos\theta ds , \quad (1.33)$$

$P_0$ 是波面 $\Sigma$ 上的点。 $\theta$ 是平面 $(\varepsilon, \eta)$ 的法线与矢量 $\vec{r}_{01}$ 的夹角， $\vec{r}_{01}$ 由 $P_0$ 点指向 $P_1$ 点。其中 $\cos$ 可以由下式给出：

$$\cos\theta = \frac{z}{r_{01}} . \quad (1.34)$$

因此，Huygens–Fresnel原理可以被写成

$$U(x, y) = \frac{z}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U(\varepsilon, \eta) \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}^2} d\varepsilon d\eta , \quad (1.35)$$

其中， $r_{01}$ 可以被写为

$$r_{01} = \sqrt{z^2 + (x - \varepsilon)^2 + (y - \eta)^2} . \quad (1.36)$$

### 1.4.2 Fresnel 近似

为了将 Huygens-Fresnel 原理简化，我们将  $P_1$  和  $P_0$  之间的距离  $r_{01}$  做近似。近似值基于方程式中平方根的二项式展开。令  $b$  等于小于单位 1 的数，并考虑表达式  $\sqrt{1+b}$  的二项式展开

$$\sqrt{1+b} = 1 + \frac{1}{2}b - \frac{1}{8}b^2 + \dots . \quad (1.37)$$

当需要计算的精度确定时， $b$  的大小决定了取多少项。此时，式1.36可写成

$$r_{01} = z \sqrt{1 + \left(\frac{x-\varepsilon}{z}\right)^2 + \left(\frac{y-\eta}{z}\right)^2} . \quad (1.38)$$

将二项式展开应用于式1.36，并保留如式1.37的前两项，可以得到

$$r_{01} \approx z \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{x-\varepsilon}{z} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{y-\eta}{z} \right)^2 \right] . \quad (1.39)$$

对于出现在等式1.35分母中的  $r_{01}$  来说，除  $z$  外，删除若干项引入的误差通常很小，可以接受。然而，对于出现在指数中的  $r_{01}$ ，误差更为严重。因为它乘以一个非常大的数  $k$ ，X 射线波长极短，在  $10^{-10}$  量级，因此  $k$  在  $10^{10}$  量级。此时毫弧度级别的相位变化都严重影响指数值的变化，因此我们在指数中保留了二项式近似的两项。则  $(x, y)$  平面的结果表达式变为

$$U(x, y) = \frac{e^{j k z}}{j \lambda z} \iint_{-\infty}^{+\infty} U(\varepsilon, \eta) \exp \left\{ j \frac{k}{2z} [(x-\varepsilon)^2 + (y-\eta)^2] \right\} d\varepsilon d\eta . \quad (1.40)$$

上式可以看成是  $U(\varepsilon, \eta)$  与  $h(x-\varepsilon, y-\eta)$  的卷积，可以表达为：

$$\begin{aligned} U(x, y) &= \iint_{-\infty}^{+\infty} U(\varepsilon, \eta) h(x-\varepsilon, y-\eta) d\varepsilon d\eta , \\ &= U(\varepsilon, \eta) \otimes h(x, y) \end{aligned} \quad (1.41)$$

其中  $\otimes$  表示卷积，卷积项  $h(x, y)$  表示为：

$$h(x, y) = \frac{e^{j k z}}{j \lambda z} \exp \left[ j \frac{k}{2z} (x^2 + y^2) \right] , \quad (1.42)$$

此时， $h(x, y)$  是自由空间传播的脉冲响应。

### 1.4.3 离散化 Fresnel 方程

为了建立计算机数值仿真模型，需要将 Fresnel 传播的表达式在  $(x, y)$  平面上离散化。如图1.10所示，定义衍射面的离散化平面为  $(x_0, y_0)$  平面，采样周期为

$\Delta x_0$  和  $\Delta y_0$ , 采样点阵坐标为  $(p_0, q_0)$ ; 同样再定义接受面为  $(x_1, y_1)$  平面, 采样周期为  $\Delta x_1$  和  $\Delta y_1$ , 采样点阵坐标为  $(p_1, q_1)$ , 上述变量满足下式:

$$\begin{cases} x_0 = p_0 \cdot \Delta x_0 \\ y_0 = q_0 \cdot \Delta y_0 \\ x_1 = p_1 \cdot \Delta x_1 \\ y_1 = q_1 \cdot \Delta y_1 \end{cases} \circ \quad (1.43)$$

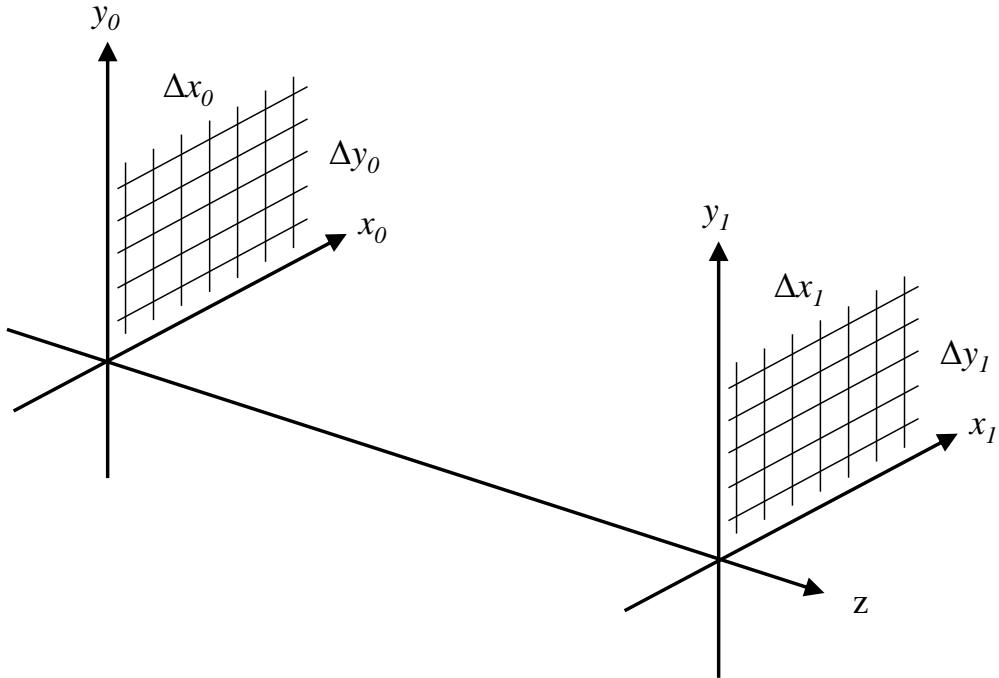


图 1.10 波前传播的离散化 Fresnel 衍射坐标系

因此, 将上式代入式1.40后, 可以得到离散化的 Fresnel 衍射公式:

$$U(p_1, q_1) = \frac{e^{jkz}}{j\lambda z} \sum_{p_0, q_0} U(m_0, n_0) \exp \left\{ j \frac{k}{2z} [(p_1 \Delta x_1 - p_0 \Delta x_0)^2 + (q_1 \Delta y_1 - q_0 \Delta y_0)^2] \right\} \circ \quad (1.44)$$

容易证明上式可以改写成如下表达

$$\begin{aligned} U(p_1, q_1) = & \frac{e^{jkz}}{j\lambda z} \exp \left\{ j \frac{k}{2z} (p_1^2 x_1^2 + q_1^2 y_1^2) \right\} \times \sum_{p_0, q_0} U(m_0, n_0) \exp \left\{ j \frac{k}{2z} (p_0^2 x_0^2 + q_0^2 y_0^2) \right\} \times \\ & \exp \left\{ -j2\pi \left( \frac{p_1 \Delta x_1 p_0 \Delta x_0}{\lambda z} + \frac{q_1 \Delta y_1 q_0 \Delta y_0}{\lambda z} \right) \right\} \circ \end{aligned} \quad (1.45)$$

显然该衍射积分可以用  $U(m_0, n_0) \exp \left\{ j \frac{k}{2z} (p_0^2 x_0^2 + q_0^2 y_0^2) \right\}$  的傅立叶变换再

乘以函数  $\frac{e^{j k z}}{j \lambda z} \exp \left\{ j \frac{k}{2z} (p_1^2 x_1^2 + q_1^2 y_1^2) \right\}$  来计算：

$$U(p_1, q_1) = \frac{e^{j k z}}{j \lambda z} \exp \left\{ j \frac{k}{2z} (p_1^2 x_1^2 + q_1^2 y_1^2) \right\} \times \text{FFT} \left\{ U(m_0, n_0) \exp \left[ j \frac{k}{2z} (p_0^2 x_0^2 + q_0^2 y_0^2) \right] \right\}, \quad (1.46)$$

其中 FFT{} 代表快速傅立叶变换，可以看出，上式的空间频率为

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta x_1} = \frac{M \cdot \Delta x_0}{\lambda z} \\ \frac{1}{\Delta y_1} = \frac{N \cdot \Delta y_0}{\lambda z} \end{cases}, \quad (1.47)$$

其中  $M$  和  $N$  是  $(x_0, y_0)$  平面分别在  $x_0$  和  $y_0$  方向的采样点总数。使用该方法计算衍射积分时，观察面的尺寸是不固定的，与几个参数有关：衍射面的尺寸，采样点数，波前传播距离和光波长<sup>[3,17]</sup>。

#### 1.4.4 基于传递函数的菲涅耳传播

根据式1.41可知，Fresnel 衍射积分可以看成波场函数与自由空间传播的脉冲响应函数的卷积。由于在空域计算卷积会花费很多时间，因此选择到频域完成。Fresnel 衍射的传递函数也就是  $h(x, y)$  的傅立叶变换为<sup>[8]</sup>

$$H(f_x, f_y) = e^{j k z} \exp [-j \pi \lambda z (f_x^2 + f_y^2)]. \quad (1.48)$$

此时，Fresnel 衍射积分可以这样计算：

$$U(x_1, y_1) = \text{FFT}^{-1} \left\{ \text{FFT} \left\{ U(x_0, y_0) \right\} \times H(f_x, f_y) \right\}. \quad (1.49)$$

使用与图1.10相同的坐标系统，我们可以得到离散化的传递函数

$$H[f_m, f_n] = e^{j k z} \exp \left[ -j \frac{2\pi^2}{k} z \left( \frac{f_m^2}{M^2 \Delta x_0^2} + \frac{f_n^2}{N^2 \Delta y_0^2} \right) \right], \quad (1.50)$$

其中  $(f_m, f_n)$  是离散傅立叶变换的频率分量的索引。波前传播的场函数通过离散傅立叶逆变换获得。该算法与式1.46不同，这种类型的离散 Fresnel 传播不会改变数据的空间采样，因此观察面的尺寸也不会发生变化。Goodman 给出了  $H(f_x, f_y)$  的一般适用形式

$$H(f_x, f_y) = \begin{cases} e^{j k z} \exp [-j \pi \lambda z (f_x^2 + f_y^2)] & f_x^2 + f_y^2 < \frac{1}{\lambda^2} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (1.51)$$

因此，该公式非常适合小传播距离  $z$ ，而对于更大的传播距离它往往变得不稳定。

### 1.4.5 夫琅和费衍射

当光从其光源孔径传播非常远时，观察面的光场分布非常接近夫琅和费衍射积分。根据 Goodman 的定义<sup>[16]</sup>，非常远传播距离定义为

$$z > \frac{2D^2}{\lambda}, \quad (1.52)$$

$z$  是传播距离， $D$  是衍射孔径大小， $\lambda$  是波长。此时，观察面上的场分布正比于孔径面上出射场的傅立叶变换，如下式：

$$\begin{aligned} U(x, y) &= \frac{\exp(jkz)}{j\lambda z} \exp(jk \frac{x^2 + y^2}{2z}) \int_{-\infty}^{\infty} \int U_0(x_0, y_0) \exp \left[ -j \frac{2\pi}{\lambda z} (x_0 x + y_0 y) \right] dx_0 dy_0 \\ &= \frac{\exp(jkz)}{j\lambda z} \exp(jk \frac{x^2 + y^2}{2z}) \text{FFT} \{ U_0(x_0, y_0) \} \end{aligned} \quad (1.53)$$

由上式可以看出，当使用平面波入射时，远场衍射图案与衍射屏透过率函数的傅立叶变换呈线性关系，因此夫琅和费衍射图样与波前传播距离  $z$  无关，但观察面尺寸比例会随  $z$  发生变化。

## 1.5 X射线波前表征

### 1.5.1 X射线波前表征技术简介

如前文介绍，第四代同步辐射光源与X射线自由电子激光装置等大科学装置具有高亮度、高相干性和高准直性等特点，X射线光束质量接近衍射极限和傅立叶变换极限，可开展高光谱分辨、高空间分辨和高时间分辨实验。X射线波前分布如光斑大小、强度轮廓分布、相位分布，焦点位置与变化等都严重影响实验质量。

目前基于可见光开发的高精度面形检测仪器有很多，如LTP<sup>[18-19]</sup>、面形干涉仪<sup>[20-21]</sup>、新型的激光散斑角度测量技术<sup>[22]</sup>，粗糙度仪和原子力显微镜等。

然而，这类仪器只能实现离线测量，不能反映实际工作条件下光学元件表面形状的变化以及实际的工作性能，这会直接影响光束的质量，包括聚焦质量和相干保持程度。近10年来，国内外X射线光学元件波前在线检测主要采用哈特曼波前传感器法<sup>[23-24]</sup>、散斑法<sup>[12,14,25-28]</sup>、Ptychography<sup>[29-33]</sup>、光栅干涉仪法<sup>[34-42]</sup>。

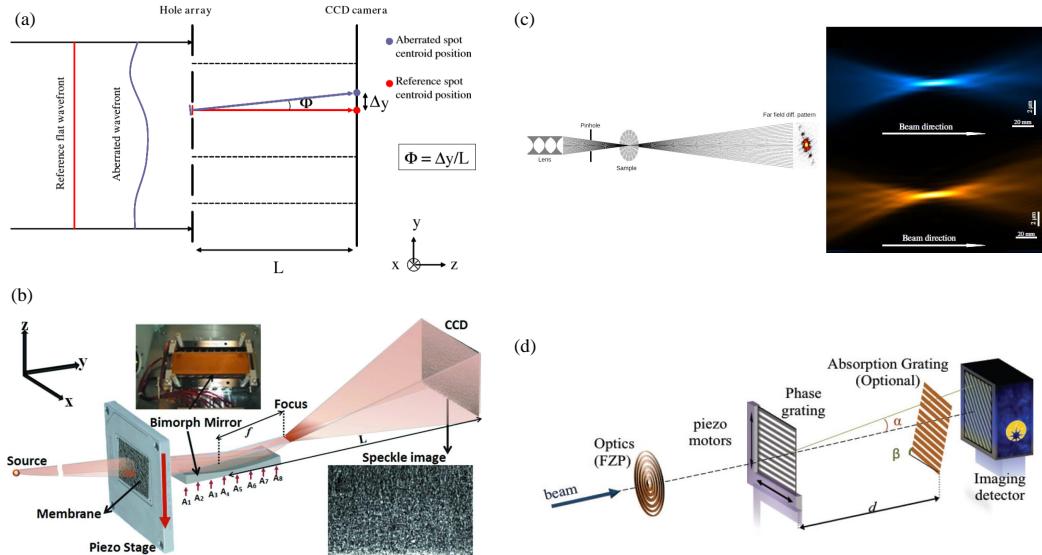


图1.11 常见的波前X射线检测方法。(a) 哈特曼波前传感器<sup>[23]</sup>, (b) 散斑干涉<sup>[28]</sup>, (c)Ptychography<sup>[30]</sup>, (d) 光栅干涉仪<sup>[14]</sup>。

哈特曼·夏克检测法原理如图1.11(a)所示，通过微孔阵列取样波前信息，畸变的波前会使出射光斑位置发生偏移，通过偏移量即可计算出这部分的斜率误差。这种方法结构简单、易操作，且可以直接恢复二维波前信息。但是在X射线波段哈特曼传感器很难校准参考点位置，微孔阵列很难做到完美的大高宽比形状，在硬X射线波段，非微孔部分要完全吸收X射线，需要厚度达到20 μm，这超出了现有加工工艺能力，且在测量时会有测量平面中相邻孔的衍射重叠问题。

X射线散斑法原理如图1.11(b)所示，当单色的部分相干光束通过随机介质如砂纸时，许多波的相互干涉会产生二维散斑图案，每个散斑图案都是独一无二

的，这种独特的性质使其可以用作波前标记，当砂纸横向于光束轴平移时，散斑图案在探测器上移动，探测器在不同帧中的不同像素位置记录相同的散斑，通过检测散斑位置变化可以恢复出一维或者二维波前信息。然而散斑干涉法需要长时间扫描，且数据量较大，处理较复杂，并严重依赖于平移台的位移精度与稳定性，在自适应光学等需要快速波前反馈信息的场景下，散斑法还需要提升效率。有些新开发的散斑检测技术，提升了速度，但牺牲了角度灵敏度和空间分辨率。

如图1.11(c)所示，Ptychography方法使用相干光束扫描物体，并在每个扫描位置记录来自物体的远场衍射图案。物体的复透过率函数和要检测的复波场分布函数均根据衍射图案以及它们在扫描中的相对位置来重建<sup>[43]</sup>。因此，即使物体失焦，也可以将重建的波场以数值方式传播到焦平面并表征焦斑。迄今为止，Ptychography已被证明是一种非常强大的技术，并且是X射线光学表征的标准技术<sup>[31,44-45]</sup>。但是Ptychography方法数据处理复杂，耗时较长，在长时间数据采集中机械稳定性，温度等都会有影响，最关键的是不能测量非相干光源以及脉冲光。

光栅干涉法一般采用相位光栅与吸收光栅的组合测量波前一维或二维相位分布，如图1.11(d)所示。其角度灵敏度高（10 nrad量级）<sup>[3]</sup>、抗干扰性好，可进行原位与工作波长下无损检测及单次脉冲测量。现有微纳加工技术可满足其光栅加工精度要求，并且其处理速度快，还可测量自由电子激光的单个脉冲波前，针对非相干光源也可进行测量，目前在世界主流的同步辐射光源与X射线自由电子激光中，光栅干涉法已经成为主要方法。

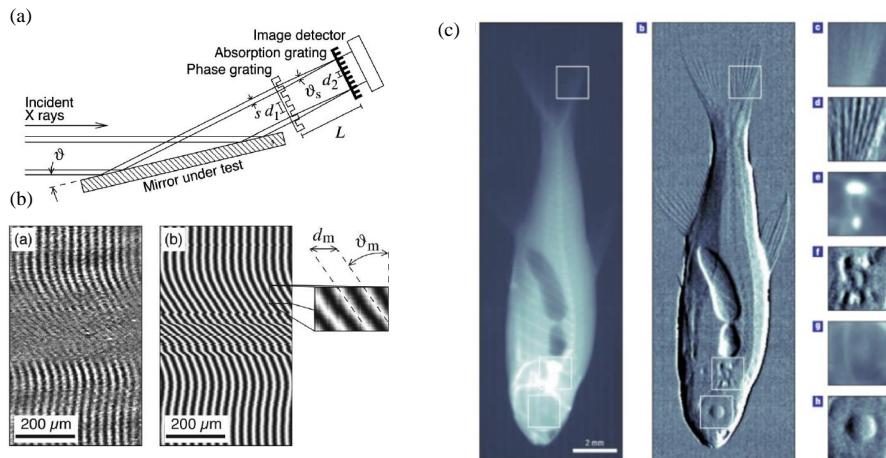


图 1.12 光栅干涉仪用于(a)面形测量与(b)相衬成像<sup>[46]</sup>。

2005年瑞士PSI首次在SLS光束线上利用光栅干涉仪恢复测量面形与波前信息，该装置可用于测量曲率半径高达几十米的波前角度分布，横向分辨率为几微米，角度灵敏度达到100 nrad<sup>[39]</sup>，如图1.12(a)和(b)所示。光栅干涉仪因具有极高的角度灵敏度，2006年PSI使用Talbot-Lau干涉仪实现实验室级X射线相衬成像，使用源光栅克服了实验室光源相干性较差的缺点，可以提取X射线穿

过物体后的相位信息，恢复出物体内部结构，因为 X 射线折射率中的折射因子比吸收因子高 2-5 个数量级，能看到更多细节信息，如图1.12(c)所示，该装置首次将 X 射线光栅干涉仪应用到实验室级生物医学成像领域。

采用 X 射线光栅干涉技术，美国阿贡国家实验室的先进光子源 (APS) 上实现了角度灵敏度 100 nrad 的斜率误差测量，证明了该工具作为光学和光束波前诊断计量仪器的重要性。如图1.13所示：

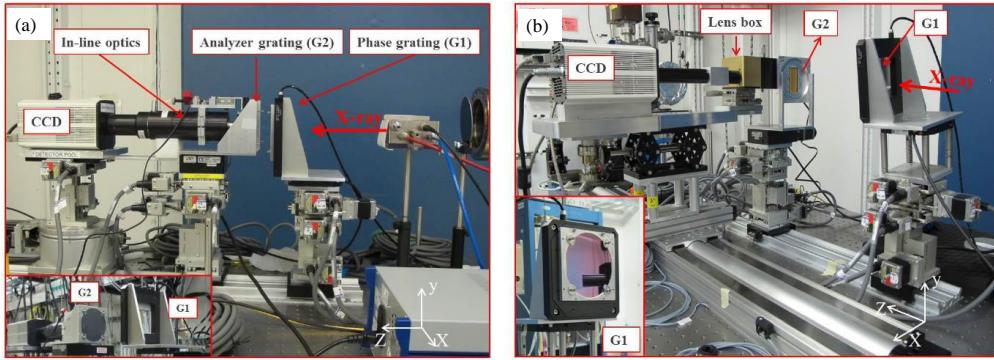


图 1.13 APS 面形在线检测装置<sup>[40]</sup>。

以上都是采用一维光栅干涉仪，只能在一个方向进行测量，通常会导致重建伪影。而二维的 X 射线光栅干涉仪可以在水平和垂直方向上同时恢复出波前微分相位。

2012 年，瑞士 PSI 首次在斯坦福国家加速器实验室 (SLAC) 实现二维光栅干涉仪的波前表征。可在工作条件下直接观察光学元件引入的波前畸变，获得具有十纳弧度角度灵敏度的脉冲波前信息，并在纵向和横向以前所未有的精度测量光源点位置和波动。

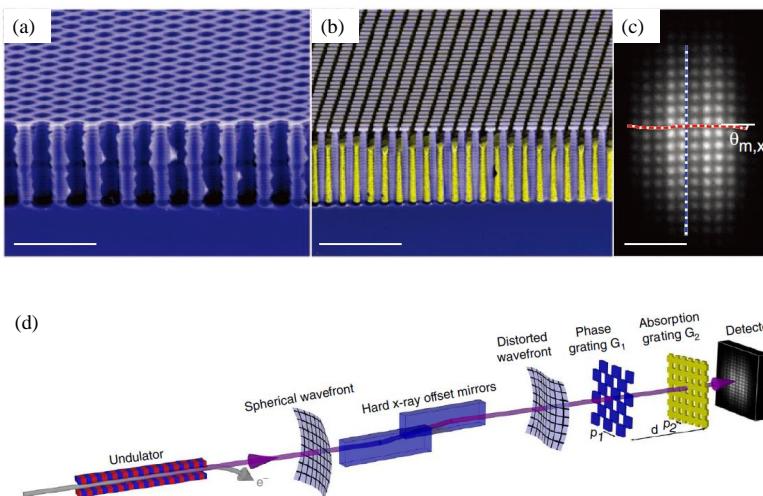


图 1.14 瑞士保罗谢勒研究所双光栅干涉测波前<sup>[47-48]</sup>。

2013 年，英国 Diamond 的 Hongchang Wang 等人使用二维 X 射线干涉仪表征菲涅耳波带片 (FZP) 下游聚焦的 X 射线波前<sup>[49]</sup>。FZP 的精细表征表明，光学

器件的性能不仅受到制造的限制，还受到入射光束缺陷的限制。

2018年，SLAC与欧洲自由电子激光装置分别用二维光栅干涉仪实现了高精度波前传感用于评价自由电子激光光束质量<sup>[50-51]</sup>，如图1.15。

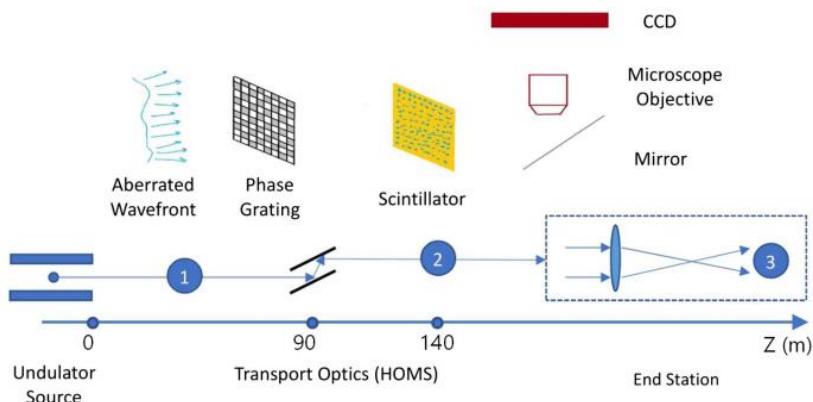


图 1.15 二维光栅干涉仪用于 X 射线自由电子激光波前测量<sup>[50]</sup>

### 1.5.2 本文的研究内容与意义

光束线系统是光源和实验站之间的桥梁，保持波前形状和高保真传递 X 射线束相干性对开展同步辐射实验具有重要意义，这对高精度光学器件的制造和检测提出了挑战。光束质量会受到反射或透射表面的粗糙度、较大范围形状误差、光学组件的未对准，光束线上超高强度光束对镜体造成的辐射损坏、反射镜机械安装（安装、夹紧、振动和应力）引起的波前传播角度误差、X 射线自适应光学波前反馈信号的测量、高热负荷光学元件冷却技术的研究，压弯反射镜或折射相位板<sup>[34,52]</sup>等波前补偿装置，都需要在线波前检测表征光学元件实际工作情况下的性能。甚至于高精度 X 射线光学元件的制造过程的测量都离不开光学元件的在线波前测量<sup>[53-54]</sup>，光束线上镜体表面的斜率误差要求低于 100 nrad，所需的高度误差通常低于 1 nm（均方根）<sup>[2]</sup>，需要高精度测量方案，X 射线波前极短，在面形测量方面更具优势，在线波前检测表征是开发高性能光源先进实验方法和技术必不可少的部分。

光栅干涉法具有极高角度灵敏度（10 nrad 量级）<sup>[3]</sup>、抗干扰性好，可用于单次脉冲测量，目前已经被广泛用于晶体单色器<sup>[53,55]</sup>、多层膜镜<sup>[38-39,42]</sup>、双压电晶片镜<sup>[56]</sup>、折射 X 射线透镜<sup>[57-58]</sup>、衍射光学器件<sup>[49]</sup>的测量，相干度测量<sup>[59]</sup>以及 X 射线自由电子激光光束的质量评价<sup>[47,50-51,60]</sup>。由于是光栅干涉无损检测技术，且对机械振动的敏感度很低<sup>[12]</sup>，欧洲同步辐射光源 (ESRF) 团队展示了在加工过程中集成在线检测技术来控制镜面形状与粗糙度<sup>[61]</sup>。通过更改光栅参数，可将该技术扩展到更软或更硬的 X 射线。

本文拟建立光栅干涉仪波前表征物理理论与与计算机数值仿真数值模型；搭建微焦点 X 射线光栅干涉仪实验平台；开发机械式与电磁式相位步进算法恢复

相位，实现高精度实验室级面形测量与波前传感。为同步辐射光源以及自由电子激光等高性能光源开发提供关键技术支撑。同时作为独立的实验仪器，也可做为X射线反射镜、折射透镜以及衍射透镜的计量工具；在镜体加工制造过程面型反馈、X射线自适应光学反馈的反馈调节等领域提供实时波前测量；在波前反馈策略与控制算法开发，波前调控机器学习训练集数据收集等方面也有广阔应用前景。

另一方面，精密X射线光学器件是开发先进实验站技术及桌面X射线仪器的关键。其中X射线旋转椭球聚焦镜是一种理想的反射聚焦光学器件，具有无色差、照明对称、易于对准、大NA，大带宽和高效率等优点，广泛应用于X射线显微镜等系统。

桌面级消色差X射线显微镜利用集成式消色差X射线透镜替代菲涅尔波带片，前者可将复色X射线聚焦到同一焦点附近，对于普通X光机的复色能谱，消色差透镜成像色差小，光通量更高，更具优势。本文拟开发成套X射线旋转椭球聚焦镜制造工艺，包括反射镜设计、电镀成型、面形测量、镀膜电铸工艺，脱模工艺等，结合集成式消色差X射线透镜，应用于桌面级消色差X射线显微镜。

精密X射线椭球聚焦镜作为关键X射线光学器件，还可以应用于微聚焦X射线荧光、微聚焦X射线相衬成像、X射线衍射测量、光谱测定以及同步加速器光束线上的多个领域。

## 1.6 小结

本章节主要介绍讲述了论文研究背景与实验的理论基础。X射线的基础理论是后面几章模拟与实验的物理基础，其中，部分相干光理论对于设计实验参数评价角度灵敏度、可见度等非常重要；X射线与物质相互作用如吸收、折射、散射，以及衍射方程、波前传播理论是波前检测、计算以及相位恢复的依据；最后介绍了波前检测的意义与光栅干涉法在波前传播领域应用现状及优势。

论文章节安排如下：

第二章介绍光栅干涉仪工作原理。详细地讨论其物理原理，包括整数 Talbot 效应与分数 Talbot 效应，球面波照明对干涉仪影响。接着介绍了光栅干涉仪用于波前表征与光学计量的原理。之后模拟了在部分相干光照明时，横向相干性与纵向相干性，即非单色拓展点光源对干涉图像可见度的影响。随后分析了光栅衍射效率，在相位光栅与分析光栅设计时如何获得最大的衍射效率。然后根据设计参数，建立光栅相位衬度成像计算机数值仿真模型，模拟 PMMA 小球 X 射线相衬成像结果，证明本系统设计可以获得很好的图像可见度，然后将基于该参数设计实验系统参数。最后分析了光栅干涉仪用于面形测量的原理。

第三章介绍光栅干涉仪平台搭建与实验技术。设计并搭建了微焦点 X 射线光栅干涉仪实验平台，完成其整体机械设计、加工和安装调试；控制系统电路设计、焊接与装配；图像采集上位机软件编写、调试；监控系统设计与装调，并确定了系统总体参数，包括光源、光栅、探测器等，并总结一套 X 射线光栅干涉仪面形测量实验技术。

第四章介绍波前表征与面形测量结果。光栅干涉仪可以在 Moiré 条纹分析模式或相位步进模式下工作。本章首先介绍了对平面镜面形测量时，采用机械式相位步进和 Moiré 计量方法方法用于相位提取；后介绍了本人提出的电磁式相位步进方法用于相位恢复，最后对比了三种不同方法的优劣。

在超精密 X 射线聚焦镜制造技术研究领域：精密 X 射线椭球聚焦镜是 X 射线显微镜的核心器件，可以收集大立体角内的光子提供高亮度照明。X 射线旋转椭球聚焦镜具有无色差、照明对称、易于对准、大 NA，大带宽和高效率等优点，且在聚焦 5-25 keV 能量范围的光子方面表现出良好的性能。在 X 射线显微术、同步辐射光源、电子探针 X 射线荧光、波长色散 X 射线荧光、X 射线衍射分析等领域具有极高应用价值。

第五章介绍了消色差 X 射线显微镜关键技术的研制。重点关注了消色差 X 射线显微镜关键光学器件——金反射面 X 射线旋转椭球聚焦镜的研制。开发了一整套制造工艺，包括反射镜的设计、电镀成型、面形测量、镀膜电铸工艺以及脱模工艺等。这些工艺的协同作用，使得金反射面 X 射线旋转椭球聚焦镜得以成

功制造。在电镀成型方面，文章详细解释了电镀面形的原理和算法，强调了电镀加工能够实现纳米级的加工精度。最后应用于搭建的消色差 X 射线显微镜，这一设计极大地提高了成像分辨率，超越了传统投影式显微镜的成像能力。关于这一部分的背景与技术细节将在第五章介绍。

## 第2章 X射线光栅干涉仪

本章将介绍光栅干涉波前测量原理。首先简要介绍光栅干涉仪工作原理，然后详细地讨论其物理原理，包括整数 Talbot 效应与分数 Talbot 效应，球面波照明对干涉仪影响。接着介绍光栅干涉仪用于波前表征与光学计量的原理、分析和仿真时间相干性与空间相干性的影响。建立光栅相位衬度成像计算机数值仿真模型，模拟 PMMA 小球相衬成像结果，证明本系统设计可以获得很好的图像可见度，最后分析光栅干涉仪用于面形测量的原理。

### 2.1 工作原理简介

光栅干涉仪基于周期性结构的衍射光在下游周期性距离处形成干涉图案<sup>[62-65]</sup>进行测量与成像，平面 X 射线照射到相位光栅  $G_1$  后在下游形成周期性的衍射条纹如图2.1(a) 所示。当在光路中放入物体时，由于 X 射线与物质相互作用时的吸收与折射效应会导致光束波前的强度与相位分布发生变化，此时，Fresnel 衍射区周期性干涉条纹也会发生移动，如图2.1(c) 所示，由于干涉图案周期较小，常规 X 射线探测器不能分辨出相移信号，通过增加吸收光栅  $G_2$  形成 Moiré 效应可以放大条纹相移信号，在 X 射线探测器上会看到扭曲的 Moiré 条纹，如图2.1(b) 和 (d) 所示。采用相位步进技术或者傅里叶分析技术可以解析出条纹相位分布，并计算出物体内部相位变化，这是 X 射线光栅干涉仪用于物体内部结构相位衬度成像的基本原理。

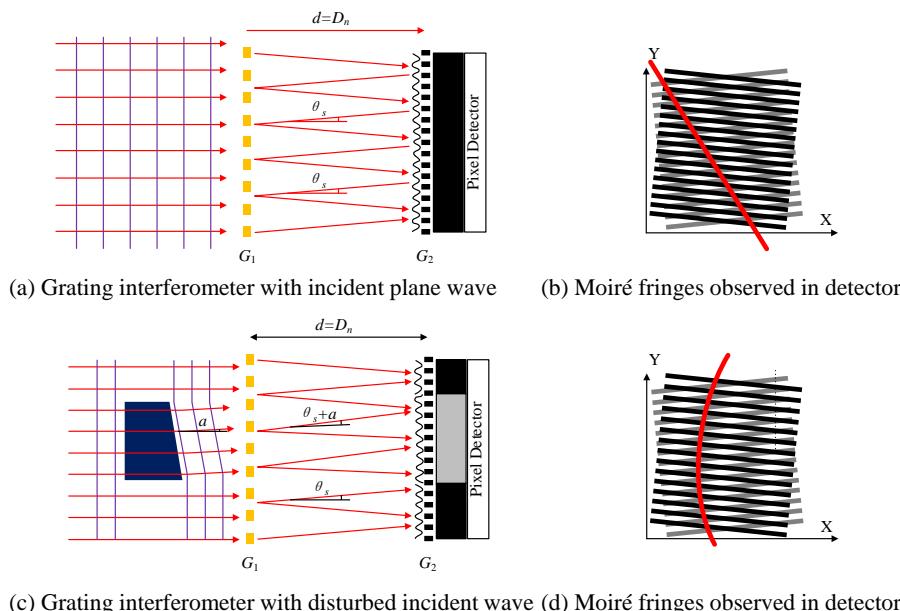


图 2.1 X 射线光栅干涉仪工作原理。(a) 平面波照射下光栅干涉仪，(b) 探测器观察到的 Moiré 条纹，(c) 扭曲的平面波照射下光栅干涉仪，(d) 探测器观察到的 Moiré 条纹。

## 2.2 Talbot 效应

当平行光束通过周期性结构（例如光栅）后，其下游会在一系列距离上形成周期性的自成像，这种效应是由于光的衍射和干涉引起的，这种现象被称为 Talbot 效应。在 Talbot 效应中，自成像之间的距离和光波的波长、结构的周期以及相移存在关联。利用 Fresnel 衍射公式，可以推导一维矩形光栅的 Talbot 自成像。Talbot 自成像效应有两种，分别为整数 Talbot 效应和分数泰伯效应 (fractional Talbot effect)。二者分别是振幅和强度的自成像。需要说明的是，分数 Talbot 效应是我们利用 X 射线光栅干涉仪进行波前检测与面形测量的基础<sup>[66]</sup>。

### 2.2.1 整数 Talbot 自成像效应

X 射线平面波在自由空间传播可以用 Fresnel 衍射公式来表示

$$U_1(x, y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \iint U_0(x_0, y_0) \exp[i\pi \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{\lambda z}] dx_0 dy_0. \quad (2.1)$$

实际使用的光栅不可能是理想的纯吸收或纯相位光栅，光栅周期内与入射光作用的部分会同时带来吸收和相位作用，因此其透过率函数可以表示为

$$T(x_0, y_0) = \begin{cases} 1 & 0 \leq (y_0 \bmod p) < \gamma p \\ A \exp[i\tau] & \gamma p \leq (y_0 \bmod p) < p \end{cases}, \quad (2.2)$$

上式中  $\gamma$  为占空比，其定义为光栅内引起相变（或吸收）物质的区域宽度  $w$  与光栅周期  $p$  之比，光栅占空比在 0-1 之间，占空比影响光栅的衍射效率，这将在2.2.4节展开介绍。根据 X 射线与物质相互作用机制，光栅材料和入射光能量不同时可将光栅分为相位光栅与吸收光栅。当光栅有材料部分的透射光完全被吸收或者振幅远小于 1 时该光栅是吸收光栅，即透过率函数的振幅部分满足  $A \ll 1$ ；当光栅有材料部分的透射光相位受到调制时，认为该光栅是相位光栅，即透过率函数的相移部分满足  $\tau \gg |1 - A|$ <sup>[67-68]</sup>。

当波长为  $\lambda$  的平面 X 射线垂直照明到周期为  $p$  的一维光栅时，假设光栅周期远大于入射波长，如图2.2所示。

将  $T(x_0, y_0)$  傅里叶级数展开后为

$$T(x_0, y_0) = \sum_n a_n \exp\left(i2\pi \frac{ny_0}{p}\right), \quad (2.3)$$

其中， $a_n$  傅里叶展开后为

$$a_n = \frac{1}{p} \int_0^p T(x_0, y_0) \exp\left[i2\pi \frac{-ny_0}{p}\right] dy_0, \quad (2.4)$$

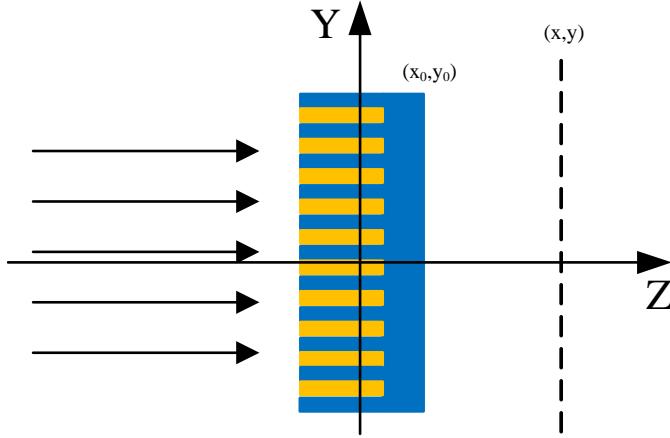


图 2.2 平面波照明下光栅的 Talbot 自成像效应。

此时，光栅的一维透过率函数可由式2.3与式2.4表示。

振幅为 1 的平面波垂直入射于透过光栅后，光场复振幅分布为

$$U(p_1, z = 0) = T(p_1) = \sum_n a_n \exp\left(2\pi i \frac{np_1}{p}\right). \quad (2.5)$$

被光栅调制后的光场  $E(x_0, y_0, z = 0)$  传播到 Fresnel 衍射区，根据方程2.1得到距离  $z$  处光场复振幅分布为

$$\begin{aligned} U(x, y, z) &= \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \int U(x_0, y_0, z = 0) \exp\left[\frac{i\pi}{\lambda z}(y - y_0)^2\right] dy_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{i\lambda z}} \cdot \exp(ikz) \sum_n a_n \exp\left[-\frac{i\pi\lambda z}{p^2} n^2\right] \exp\left(\frac{i2\pi ny}{p}\right), \end{aligned} \quad (2.6)$$

忽略常数相位因子，对比式2.3与式2.6发现，光栅 Fresnel 衍射的复振幅分布  $U(x, y, z)$  与光栅的复振幅透过率函数  $T(x_0, y_0)$  只相差一个与距离  $z$  有关的相位因子。很显然，当距离  $z$  满足

$$z = m \frac{2p^2}{\lambda} (m = 0, \pm 1, \dots) \quad (2.7)$$

时， $U(x, y, z)$  与  $T(x_0, y_0)$  完全相同，此时可认为 Fresnel 衍射的复振幅分布是光栅自身的像。我们把这一现象称为 Talbot 效应，满足式2.7的自成像距离  $z$  称之为 Talbot 距离。式2.7中， $m$  只能取整数。这种情况下的 Talbot 效应被称为整数 Talbot 效应， $z$  被称为整数 Talbot 距离，以区别于后面介绍的分数 Talbot 效应和分数 Talbot 距离。

式2.6的是光场复振幅的分布，而不是强度的分布，X射线探测器只能检测到光场强度分布，因此需要光场的强度分布出现周期性的变化。对于振幅光栅情形，整数 Talbot 距离处的光强分布出现周期性的变化，出现强度的自成像，能够用于光栅干涉仪测量；而对于相位光栅情形，整数 Talbot 距离处的光强是均匀

的<sup>[69]</sup>, 不能够用于相位检测。如下面内容所述, 相位光栅的自成像在分数 Talbot 效应具有较高的条纹可见度, 被目前 X 射线光栅干涉仪普遍采用以求获得较高的条纹可见度。

### 2.2.2 分数 Talbot 自成像效应

相位光栅的分数 Talbot 效应发生在非整数的 Talbot 距离处, 在分数 Talbot 距离处, 光强分布出现周期性变化<sup>[70]</sup>。基于 1971 年 Guigay 的工作, 下面对一维光栅的分数 Talbot 效应进行分析<sup>[71]</sup>。

分数 Talbot 距离表示为

$$z = \frac{m_1}{m_2} \frac{2p^2}{\lambda} = \frac{m_1}{m_2} \times z_T , \quad (2.8)$$

其中  $z_T = 2p^2/\lambda$  是一阶整数 Talbot 距离,  $m_1$  与  $m_2$  是两个互质的数且  $m_1 < m_2$ 。将其代入式2.6时, 此时光场的复振幅分布为

$$U(x, y, z) = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{2m_2 m_1}} \sum_{m=1}^{m_1 m_2} T(y + \frac{mp}{m_2}) \exp(\frac{i\pi m^2}{2m_1 m_2}) [1 + i^{m_1 m_2} (-1)^m] , \quad (2.9)$$

式2.9中, 当  $m_1 m_2 = 4q$  ( $q$  是整数) 时,  $i^{m_1 m_2} = 1$ , 此时只有当  $m$  为偶数时, 光场振幅不为 0; 当  $m_1 m_2 = 4q + 2$  时,  $i^{m_1 m_2} = -1$ , 此时, 只有当  $m$  为奇数项时, 光场振幅不为 0。式2.9给出了周期为  $p$  的相位光栅在任意分数 Talbot 距离处的光场振幅分布, 进而可以得到光强分布。并且, 这个结果对于任意形状(矩形、三角形或正弦)的周期光栅都有效, 同时这个自成像的光强分布周期并不一定和物体透过率函数的周期一致。

X 射线照射到吸收光栅时, 光栅透过率函数反映吸收变化, 无相位项。此种情况较为简单, 如图2.3(a)是一个周期为 5 μm、占空比为 0.5 的理想吸收光栅, 在 8 keV 的 X 射线平面波照射下, 光栅衍射强度沿 Z 轴分布模拟图, 也被称为 Talbot 光毯。可以发现在  $z = Np^2/\lambda$  ( $N = 1, 3, 5 \dots$ ) 处可以看到周期性的干涉条纹, 其周期等于吸收光栅周期。

下面我们考虑一个周期为  $p$  相移为  $\phi$ , 占空比为  $\gamma$  为 0.5 的举行透射相位光栅, 其透过率函数为

$$T(x_0, y_0) = \begin{cases} 1 & 0 \leqslant (y_0 \bmod p) < \gamma p \\ A \exp[i\phi] & \gamma p \leqslant (y_0 \bmod p) < p \end{cases} . \quad (2.10)$$

#### 1. π/2 相位光栅

当  $z = \frac{1}{4} \frac{2p^2}{\lambda} = \frac{1}{4} z_T$ ,  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 4$ ,  $m$  为 2, 4, 6, 8 等偶数时, 光场函数为

$$U(x, y, z_T/4) = \frac{\exp[ikz]}{\sqrt{2}} \left\{ i \exp[i\phi(y + \frac{p}{2})] + \exp[i\phi(y)] \right\} . \quad (2.11)$$

其光强分布为

$$\begin{aligned} I(x, y, z_T/4) &= U^*(x, y, z_T/4) \times U(x, y, z_T/4) \\ &= 1 + \sin[\phi(y) - \phi(y + p/2)] \end{aligned} \quad (2.12)$$

对于  $\pi/2$  相位光栅,  $\phi(y) - \phi(y + p/2) = \pm\pi/2$ , 光强分布满足

$$I(x, y, z_T/4) = \begin{cases} 0 & Np \leq y \leq p/2 + Np \\ 2 & p/2 + Np \leq y \leq (N+1)p \end{cases}, \quad (2.13)$$

上式说明光栅在  $z = p^2/2\lambda$  处出现光强的周期性变化, 即  $\pi/2$  相位光栅的分数 Talbot 自成像, 也即干涉条纹, 其周期和光栅周期相同。类似推到得到, 当传播距离  $z$  满足下式

$$z = D_N = N \times \frac{p^2}{2\lambda} \quad (N = 1, 3, 5..), \quad (2.14)$$

能够观察到  $\pi/2$  相位光栅的分数 Talbot 自成像, 自成像周期等于光栅周期。其中  $N$  称之为 Talbot 阶次。但在相邻阶次会偏移半个周期, 即出现光强衬度反转。一个周期为  $5 \mu\text{m}$ 、占空比为 0.5、相位移动为  $\pi/2$  的理想相位光栅在  $8 \text{ keV}$  的 X 射线平面波照射下的 Talbot 光毯模拟如图2.3(b)所示, 可以发现在  $z = Np^2/2\lambda$  ( $N = 1, 3, 5 \dots$ ) 处得到和光栅周期相同的自成像。

## 2. $\pi$ 相位光栅

当  $z = \frac{1}{16} \frac{2p^2}{\lambda} = \frac{1}{16} z_T$ ,  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 4$ ,  $m = 2, 4, 6, 8$  等偶数时, 此时光场变为

$$\begin{aligned} U(x, y, z_T/16) &= \frac{1}{\sqrt{32}} \sum_{m=1}^{16} T(y + mp/16) \exp[i\pi m^2/32] [1 + (-1)^m] \\ &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left[ \begin{array}{l} T(y + p/8) \exp(i\pi/8) + iT(y + 2p/8) + \\ T(y + 3p/8) \exp(i9\pi/8) + iT(y + 4p/8) + \\ T(y + 5p/8) \exp(i9\pi/8) + iT(y + 6p/8) + \\ T(y + 7p/8) \exp(i\pi/8) + iT(y + p) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

对于  $\pi$  相位光栅,  $\phi(y) - \phi(y + p/2) = \pm\pi$ , 其振幅透过率函数满足

$$\begin{aligned} T(x, y) + T(x, y + p/2) &= \exp[i\phi(y)] + \exp[i\phi(y + p/2)] \\ &= \exp[i\phi(y)] + [1 + \exp(\pm i\pi)] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

其对应的光场分布为

$$\begin{aligned} E(x, z_1/16) &= \frac{\exp(i\pi/8)}{\sqrt{2}} [T(x + p/8) - T(x + 3p/8)] \\ &= \frac{\exp(i\pi/8)}{\sqrt{2}} [\exp[i\phi(x + p/8)] - \exp[i\phi(x + 3p/8)]] \end{aligned} \quad (2.17)$$

(a) absorption grating

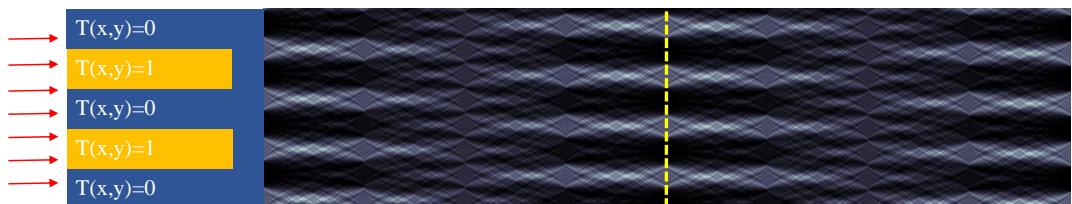
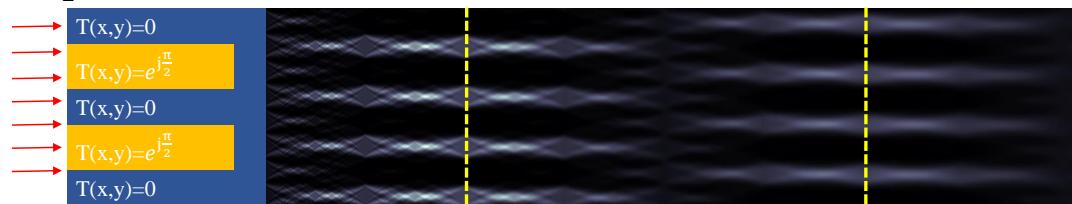
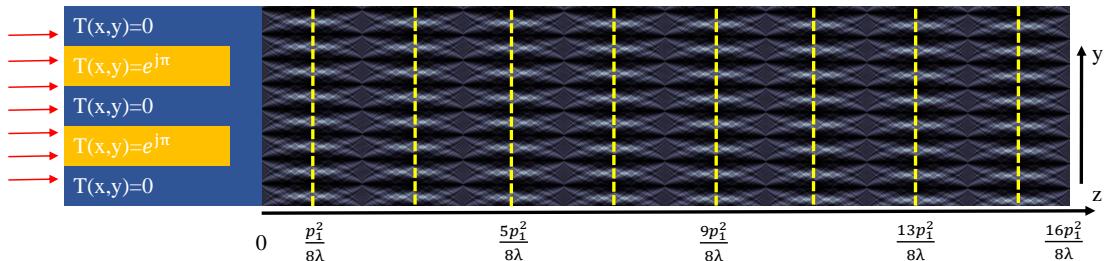
(b)  $\frac{\pi}{2}$  phase shifting grating(c)  $\pi$  phase shifting grating

图 2.3 单色平面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离光强分布 (Talbot 光毯)，入射 X 射线光子能量 8 keV，光栅周期 5  $\mu\text{m}$ 。(a) 吸收光栅，(b)  $\frac{\pi}{2}$  相位光栅，(c)  $\pi$  相位光栅。

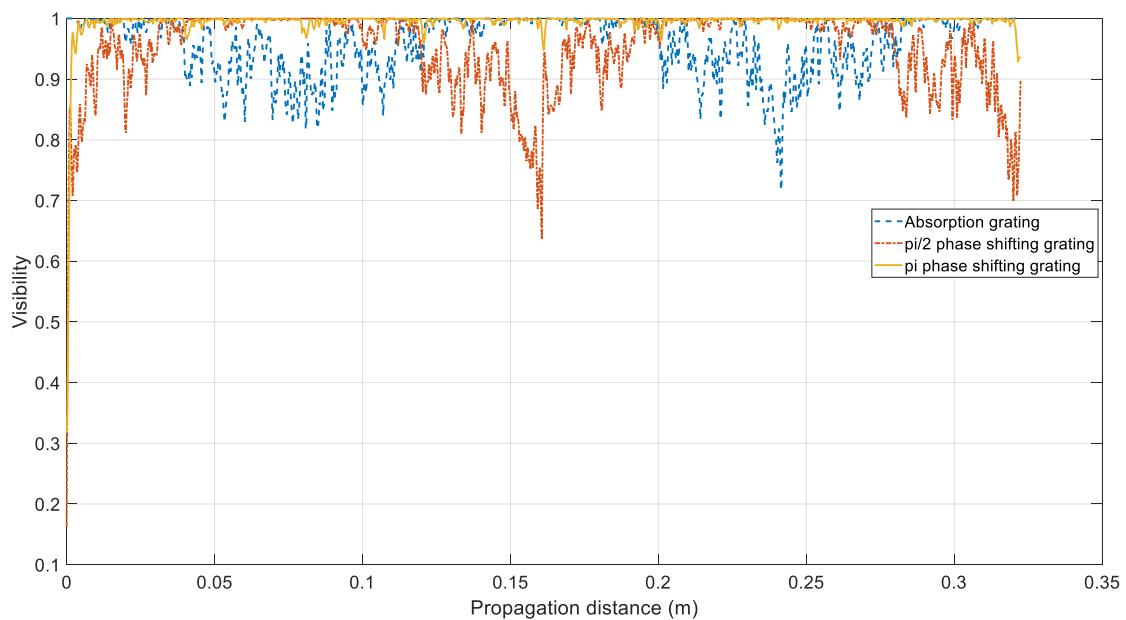


图 2.4 单色平面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离处可见度分布。

相应的光强分布为

$$\begin{aligned}
 I(x, z_T/16) &= E(x, z_T/16)E^*(x, z_T/16) \\
 &= 1 - \cos[\phi(x + \frac{p}{8}) - \phi(x + \frac{3p}{8})] \\
 &= \begin{cases} 0 & (N - 1/8)p \leq x \leq (N + 1/8)p \\ 2 & (N + 1/8)p \leq x \leq (N + 3/8)p \\ 0 & (N + 3/8)p \leq x \leq (N + 5/8)p \\ 2 & (N + 5/8)p \leq x \leq (N + 7/8)p \end{cases} \quad (2.18)
 \end{aligned}$$

上式说明  $\pi$  相位光栅在  $z = p^2/8\lambda$  处出现光强的周期性变化，干涉图案周期  $p_1^*$  与相位光栅周期  $p_1$  关系为  $p_1^* = p_1/2$ 。相同的推导可以得到，当传播距离  $z$  满足下式

$$z = D_N = N \times \frac{p^2}{8\lambda} \quad (N = 1, 3, 5..), \quad (2.19)$$

其中  $N$  称之为 Talbot 阶次。且各 Talbot 阶次光强分布相同，不会出现衬度反转。一个周期为  $5 \mu\text{m}$ 、占空比为 0.5、相移量为  $\pi$  的理想相位光栅在 8 keV 的 X 射线平面波照射下的 Talbot 光毯模拟如图2.3(c) 所示，可以发现在  $z = Np^2/8\lambda$  ( $N = 1, 3, 5 \dots$ ) 处得到周期为光栅周期一半  $p/2$  的自成像。

相位光栅是 X 射线光栅干涉仪的主要光学元件——作为光栅干涉仪的分束光栅，相比于吸收光栅它们具有更高的光子利用率。 $\pi$  或  $\pi/2$  相移的矩形相位光栅是两种最常用的方案，其原因是它们在最大衬度位置处得到规则的矩形自成像，便于计算测量。

### 2.2.3 球面波照明

以上讨论都是基于平面波照明的情况，实际实验中遇到的情况一般是部分相干的球面波照明。由于  $\pi$  相位光栅衍射效率最高，因此我们实验选择  $\pi$  相位光栅，关于光栅衍射效率问题将在下一节讨论。

根据分数 Talbot 效应，在距离  $\pi$  相位光栅  $D_N$  处显示出最大的调制度，即会出现相位光栅的自成像，

$$D_N = \frac{Np_1^2}{8\lambda}, \quad (2.20)$$

这是对于平行光束入射时的公式，其中， $\lambda$  是 X 射线波长， $p_1$  是光栅  $G_1$  的周期， $N$  是与分数 Talbot 距离阶次相对应的奇数整数。对于球面光束，考虑在球面波照射下的几何放大率，Talbot 距离调整为

$$Z_N = \frac{R \cdot D_N}{R - D_N} = M \cdot D_N, \quad (2.21)$$

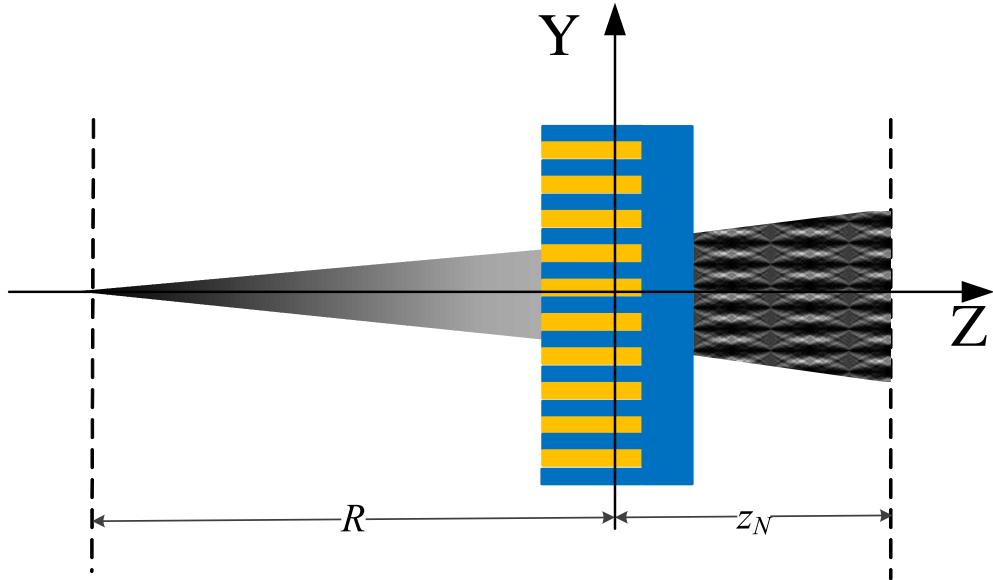


图 2.5 球面波照明下的 Talbot 自成像

其中  $R$  为光源与光栅  $G_1$  之间的距离,  $N$  是放大系数:

$$M = \frac{R}{R - D_N} \text{ 或 } M = \frac{R + Z_N}{R}。 \quad (2.22)$$

球面光束的干涉图样的横向周期  $p_2^*$  调整为:

$$p_2^* = \frac{M p_1}{\eta}， \quad (2.23)$$

其中,  $\pi$  相位光栅的衍射效率最高,  $\pi$  相位光栅更适合于高阶 Talbot 效应实验, 在高阶 Talbot 阶处,  $\pi$  相位光栅的可见度要高于  $\pi/2$  相位光栅<sup>[72-74]</sup>。同时, 与  $\pi/2$  相位光栅相比,  $\pi$  相位光栅对光源的空间相干性要求更低<sup>[9,72]</sup>。当选用  $\pi$  相位光栅时,  $\eta=2$ 。

#### 2.2.4 光栅衍射效率

衍射效率是光栅的一个重要参数, 因为它将严重影响光学衍射系统的光强度分布, 在特定衍射级下实现高衍射效率非常具有挑战性。矩形轮廓相位光栅的衍射示意图如图 2 所示, 其中  $a$  为凸起宽度,  $b$  为光栅周期,  $h$  为凹陷槽深。光栅占空比  $\gamma$  定义为有材料部分宽度与周期的比值  $\gamma = a/b \cdot 100\%$ 。

平面 X 射线在垂直入射下照射光栅, 通过这种光栅的光的相位根据光栅轮廓进行调制。光栅表面凸起部分引起的相位调制幅度  $\Delta\phi$  可表示为

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot h \cdot \Delta n， \quad (2.24)$$

其中  $\lambda$  是光波长,  $\Delta n$  光栅材料的折射率。

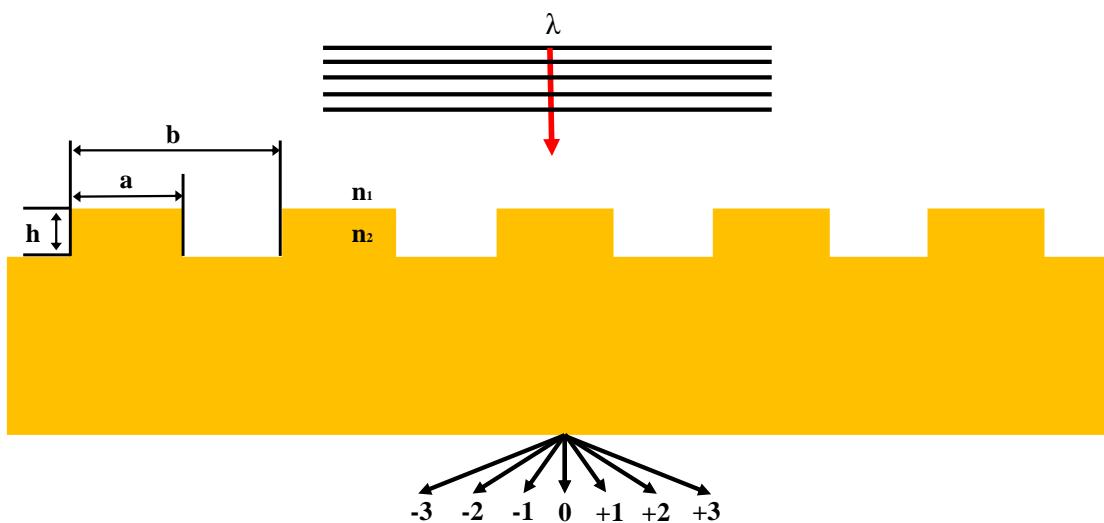


图 2.6 矩形轮廓相位光栅的光衍射示意图

具有任意轮廓的光栅的衍射效率可以通过傅里叶级数展开来分析计算<sup>[16]</sup>。对于矩形轮廓的光栅，不考虑材料吸收只考虑相位折射时，衍射效率可以用简单的公式表示为<sup>[75]</sup>：

$$\eta_0 = 1 - 2\gamma + 2\gamma^2 + 2\gamma(1 - \gamma) \cos \Delta\phi \quad (2.25)$$

$$\eta_m = \frac{4}{\pi^2 m^2} \sin(\pi m \gamma) \sin^2(\Delta\phi/2), \quad (2.26)$$

式中， $\eta_0$  是光栅 0 级衍射效率， $\eta_m$  是光栅第  $m$  级衍射效率， $\gamma$  是光栅占空比。根据以上公式，可以计算占空比为 0.5 时，光栅衍射从 0 到 6 级的衍射效率如图 2.7 所示，可以看出，相位光栅在  $\pi$  相位调制处  $\pm 1$  级具有最高的衍射效率。

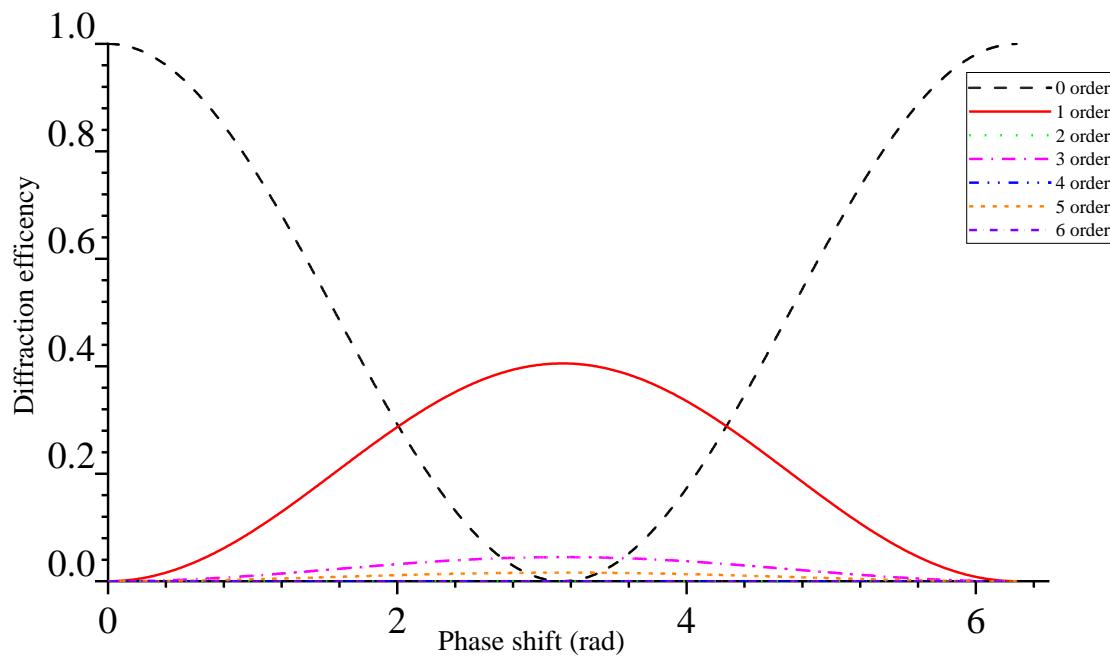


图 2.7 占空比为 0.5，不考虑光栅吸收，不同相位光栅在不同级次的衍射效率。

当考虑材料吸收时, 光栅衍射效率最大处取决于不同材料与入射波长。首先模拟入射光能量为 8 kev, 光栅材料为金时, 不同占空比和相位移动情况下光栅衍射效率, 图中给出了 0、1、2、3、4、5、6 级的衍射效率, 此时 1 级衍射最高点占空比为 0.54, 相位移动为 3.13, 可以看出此时最大衍射效率处占空比不是 0.5, 相位移动也不是  $\pi$ , 2.8(a) 显示在占空比为 0.54, 不同级次衍射效率随相位移动分布图; 2.8(b) 显示在相位移动为 3.13, 不同级次衍射效率随占空比分布图。

因此, 设计光栅时若要精确控制衍射效率, 应同时考虑吸收和折射相位带来的影响, 光栅周期和高度都要根据波长与相位进行调整。在硬 X 射线波段, 其影响较小, 有时可以忽略, 但在软 X 射线中, 其受材料吸收影响更严重。当改变入射光能量为 70 ev, 光栅材料为金时如图2.8(c) 和 (d), 当 1 级衍射效率最高时, 占空比为 0.58, 相位移动为 3.06, 可以看出, 相较于 8 keV 时, 光栅 1 级衍射效率最大处, 相较于不考虑吸收时相位和占空比偏移都较大。光栅干涉仪中  $\pi$  相位光栅 Talbot 自成像是  $\pm 1$  级衍射光相互干涉的结果<sup>[9]</sup>, 衍射光栅在  $\pm 1$  级具有最大的衍射效率时, 光栅干涉仪 Talbot 自成像也具有最高可见度<sup>[54,60]</sup>。

由此也可以看出, 改变光栅的占空比和相位移动量可以平滑地调节衍射效率, 并按照所需的衍射级改变光强, 这也是 Dammann 光栅设计的思路。本文中 X 光机的特征辐射谱在 8-9 keV 之间, 吸收较小, 在设计时采用  $\pi$  相位光栅, 此时衍射效率最高。

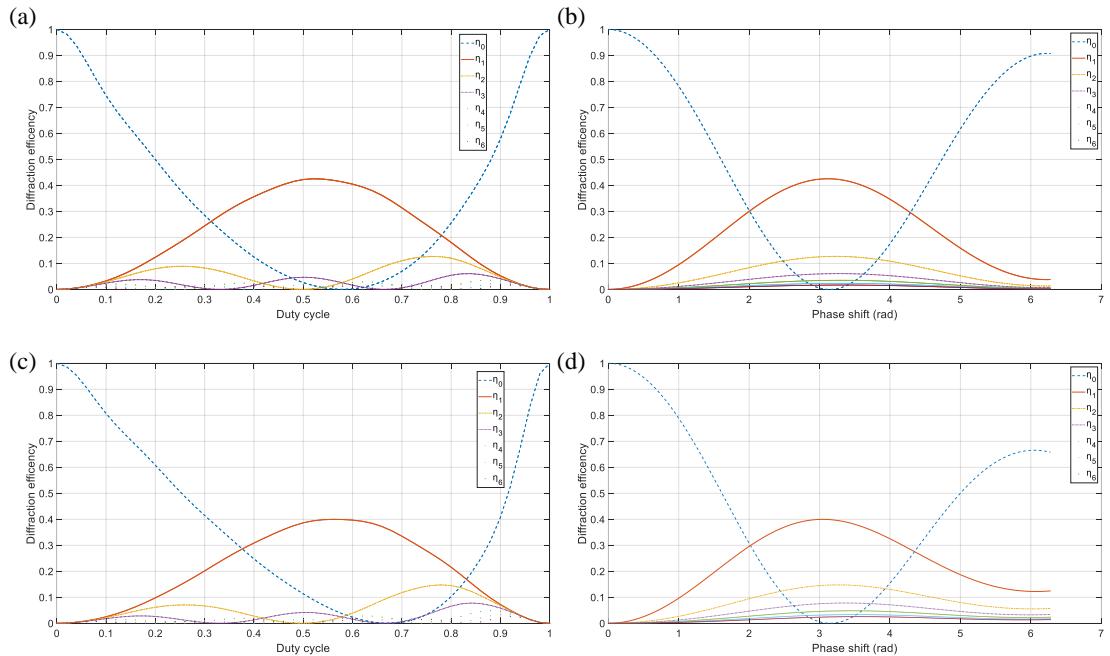


图 2.8 考虑吸收与折射时光栅占空比。8 kevX 射线入射时, (a) 光栅占空比为 0.54 时, 不同级次衍射效率随相位移动分布图, 和 (b) 光栅相位移动为 3.13 时, 不同级次衍射效率随占空比分布图; 70 evX 射线入射时, (c) 光栅占空比为 0.58 时, 不同级次衍射效率随相位移动分布图和 (d) 光栅相位移动为 3.06 时, 不同级次衍射效率随占空比分布图。

### 2.3 模拟部分相干光照明对光栅干涉仪影响

上一章已经指出X射线源不是完全相干的，其是一个非单色的拓展点光源。要使相位光栅产生干涉条纹，光源尺寸必须满足空间相干条件，而光谱宽度也会影干涉条纹衬度。因此，接下来讨论并模拟部分相干光照明下，干涉条纹可见度的变化是否满足实验需求，其中主要考虑时间相干性与空间相干性。

#### 2.3.1 时间相干性分析

光源多色性会导致干涉条纹可见度出现下降。Pfeiffer提出光栅干涉仪可接受带宽为10%<sup>[46]</sup>，在这个范围内自成像可见度影响较小。从时间相干性要求分析对微焦点光源的要求，根据Simon Rutishauser<sup>[3]</sup>和Irene Zanette<sup>[9,76]</sup>总结得到，光栅干涉仪具有非常好的消色差性，可接受带宽 $\Delta\lambda/\lambda$ 为10%，条纹差异只有0.6%。

(a) absorption grating

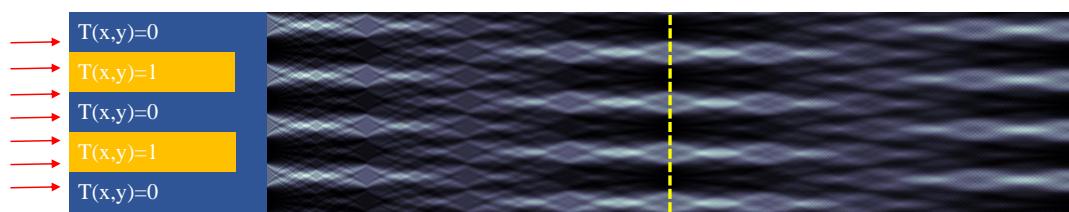
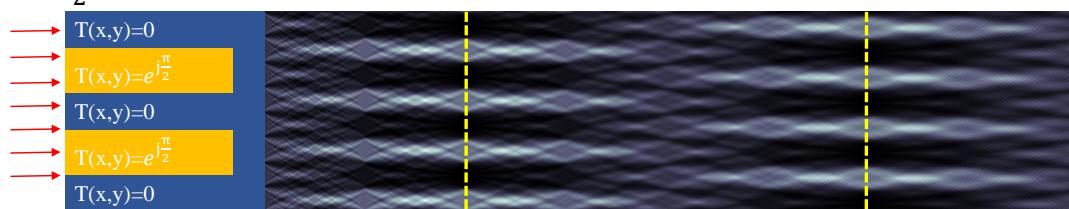
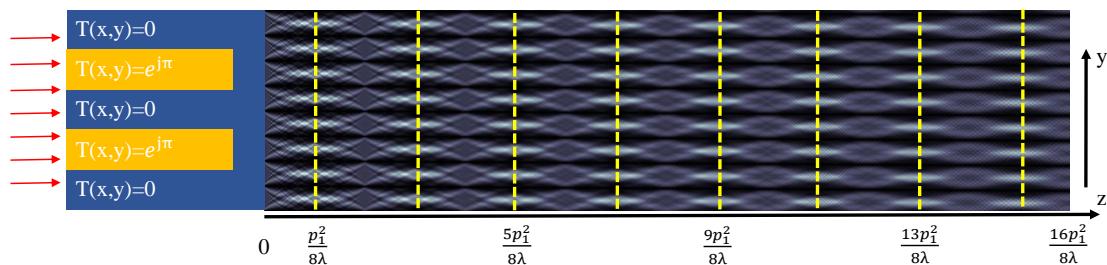
(b)  $\frac{\pi}{2}$  phase shifting grating(c)  $\pi$  phase shifting grating

图2.9 模拟复色平面波照射下，三种衍射光栅 $G_1$ 下游不同距离光强分布(Talbot光毯)，中心光子能量8keV，带宽 $\Delta\lambda/\lambda=0.1$ ，光栅周期5μm。(a)吸收光栅，(b) $\frac{\pi}{2}$ 相位光栅，(c) $\pi$ 相位光栅。

使用复色光时观察到的强度分布可以视为单色波的非相干叠加，并根据其强度进行加权<sup>[3]</sup>。多色能谱光源对干涉仪的影响主要有两点：第一，干涉条纹最大对比度平面所在的位置取决于波长(公式2.20)，多色能谱会导致条纹对比度下

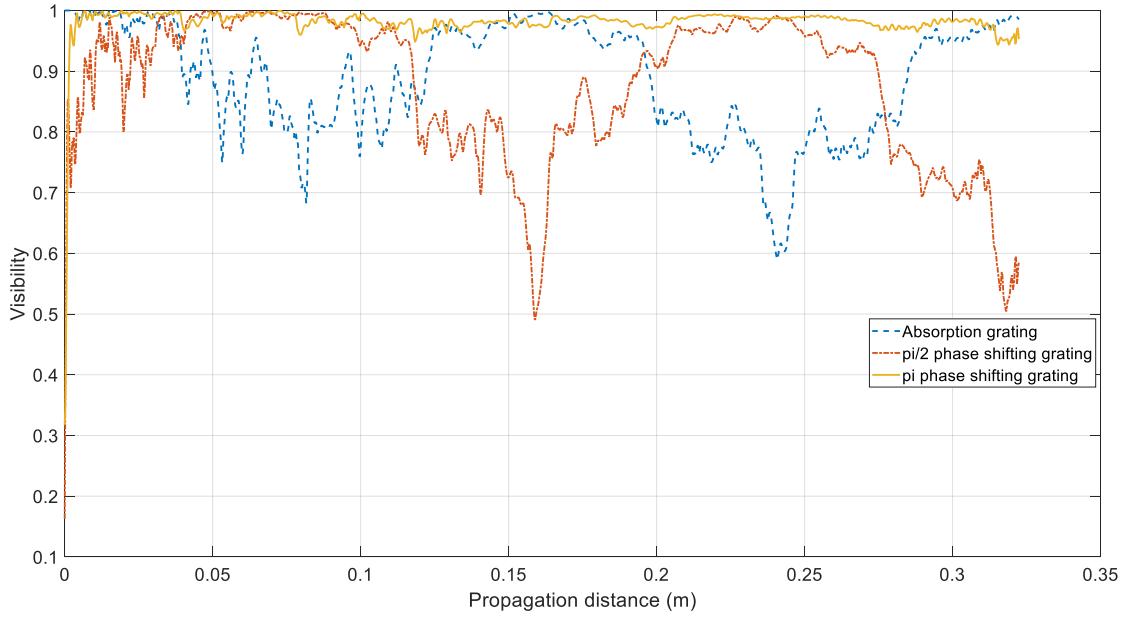


图 2.10 复色平面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离处可见度分布。

降；第二，当使用相移相位光栅  $G_1$  时，光栅的相位移动量也取决于波长。这两种效应都会导致 Talbot 光毯的模糊。

模拟 8 keVX 射线平面波下复色能谱对可见度的影响如图2.9和2.10所示，波前传播距离根据公式2.20计算，最大模拟至  $16p_1^2/(8\lambda)$  距离处。因为多色光照明，模糊效应主要发生在光轴方向上，光栅的 Fresnel 衍射强度分布沿传播方向出现扭曲。并且，这种扭曲随着传播距离的增加而越来越严重。相应地，自成像条纹的可见度随着传播距离的增加而逐渐降低，更高 Talbot 阶数可以带来更高的角度灵敏度，因此，对于高需要高角度灵敏度的实验，它变得更加重要。

但是从模拟结果来看，以  $\pi$  相位光栅为例，在 15 阶 Talbot 距离处，光栅干涉条纹可见度依然有 95% 以上，非常接近于 1，因此，光栅干涉仪中复色光时间相干性引起的可见度降低非常微弱，这也是可以使用普通 X 光机作为 X 射线光栅干涉仪光源的原因。

### 2.3.2 空间相干性分析

要使相位光栅产生干涉条纹，光源尺寸必须满足空间相干条件，考虑光源尺寸为有限大小  $\Omega$ ，光栅干涉仪中空间相干长度  $\Lambda_c$ (式1.25) 必须远大于干涉光束间距  $p_1^*$ (式2.23):

$$\Lambda_c = \frac{\lambda z}{2\pi\sigma_x} \gg p_1^* = \frac{Mp_1}{\eta}, \quad (2.27)$$

在这种情况下，干涉图样才表现出较好的的调制度，具有较高的条纹可见度，其中  $\sigma_x$  为光源强度沿  $x$  方向高斯分布的标准差。

在模拟时，空间相干性对光栅干涉测量的影响可以通过单独各个点光源的

光非相干地传播强度之和加权来模拟<sup>[8]</sup>。这相当于将干涉图案与光源轮廓在探测器面的投影进行卷积<sup>[77]</sup>，投影为中心投影，投影中心在相位光栅  $G_1$  上，光源尺寸在干涉图样平面上的投影源尺寸  $\Omega'$  由下式给出

$$\Omega' = \frac{\Omega d}{R_0} \quad (2.28)$$

$\Omega$  是光源半高宽尺寸， $d$  是相位光栅距离干涉图样面，即探测器面的距离， $R_0$  是点光源到探测器平面的距离，一般同步加速器的投影的光源尺寸比干涉图样周期小一个数量级，因为其光源和实验站距离较远，空间相干长度可以在自由空间传播时得到改善。如图2.11所示，模拟同步辐射复色点光源照明下三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离光强分布 (Talbot 光毯)，能谱带宽为 10 %，光斑半高宽大小为 100  $\mu\text{m}$  时，可以看出，Talbot 阶数越大，投影的光源尺寸越大，干涉图案变得越模糊。

针对实验室级 X 光机，也考虑时间相干性和空间相干性对干涉条纹衬度的影响。如图2.13，模拟了 X 射线光管球面波照射下，能谱带宽为 10 %，光斑半高宽大小为 5  $\mu\text{m}$  时，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离光强分布 (Talbot 光毯)。对同步辐射光源和 X 光机模拟的波前传播距离都根据公式2.21计算，最大模拟至  $M \cdot 16p_1^2/(8\lambda)$  距离处，因为二者光源距离光栅距离不同，具有不同的放大倍数，根据公式2.21计算，二者实际传播距离不同。

从图2.12与图2.14的对比可以看出，在光通量相同，光栅周期相同，相移相同的情况下，尽管同步辐射光源焦点尺寸较大，但是同步辐射光在高阶 Talbot 距离处表现出明显优异的条纹可见度。这是因为同步辐射光源距离光栅距离较远，空间相干性可以通过增加光在自由空间的传播距离得到改善，而 X 光机受制于空气损耗，发散角，光通量较弱等，无法具有长传播距离，也因此，同步辐射光相比较普通 X 光机具有较大的空间相干长度。并且同步辐射光源亮度比 X 光机高 10 个数量级以上，也更适合做高阶 Talbot 距离的实验，可以带来更高的角度灵敏度。

(a) absorption grating

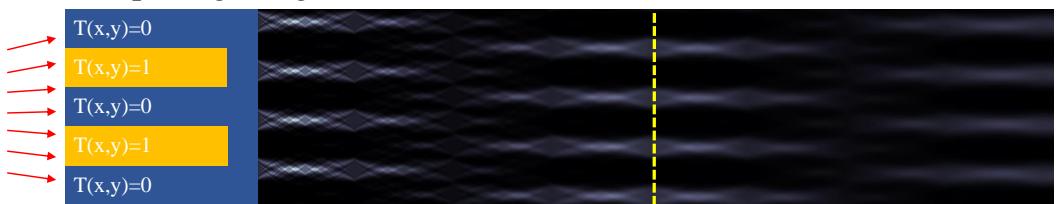
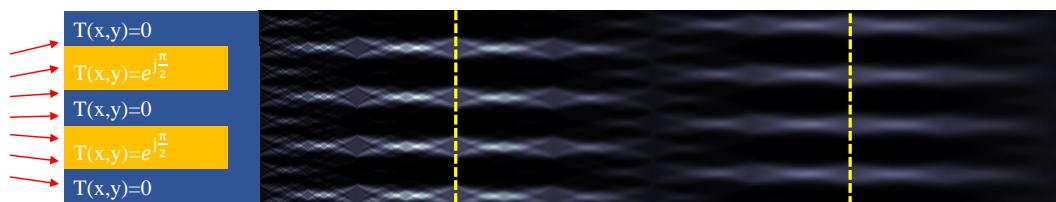
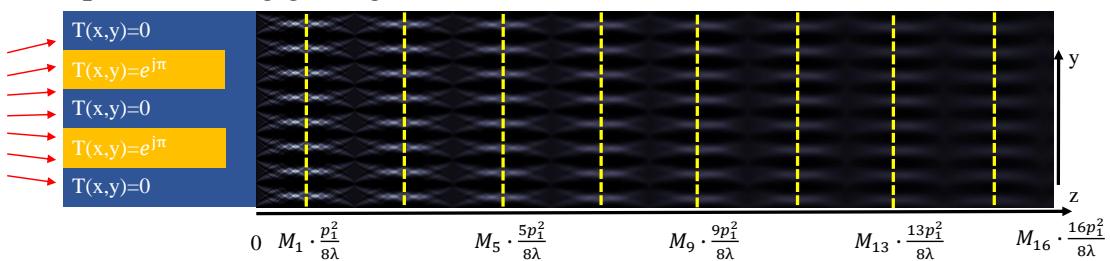
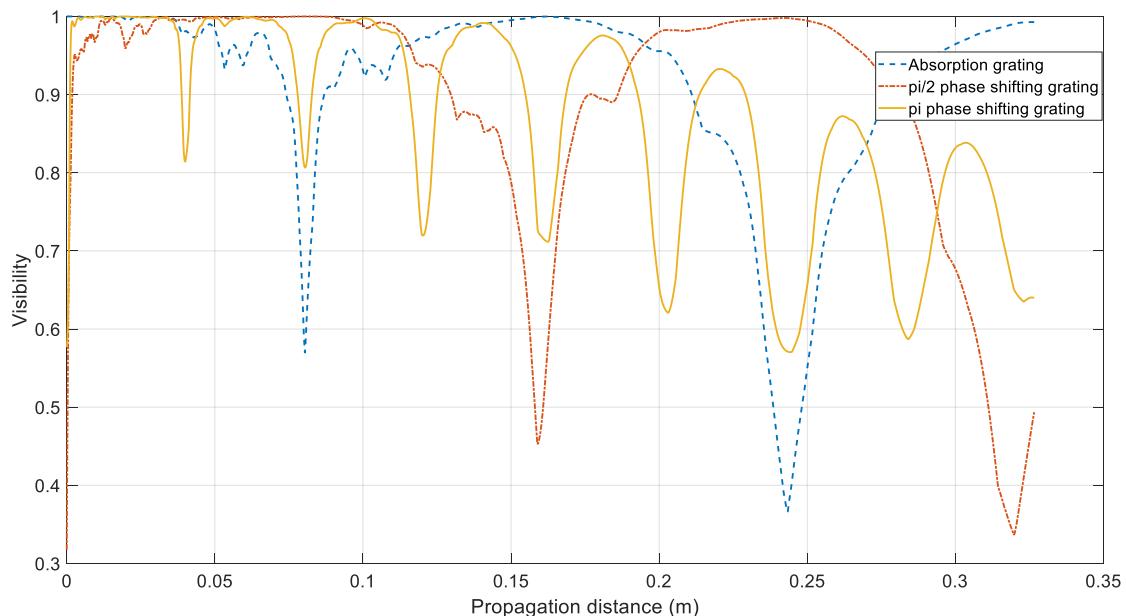
(b)  $\frac{\pi}{2}$  phase shifting grating(c)  $\pi$  phase shifting grating

图 2.11 模拟同步辐射复色光球面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离光强分布 (Talbot 光毯)，光源尺寸  $100 \mu\text{m}$ ，光源与光栅  $G_1$  距离  $R=25\text{m}$ ，光栅周期  $5 \mu\text{m}$ 。(a) 吸收光栅，(b)  $\frac{\pi}{2}$  相位光栅，(c)  $\pi$  相位光栅。

图 2.12 复色平面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离处可见度分布。

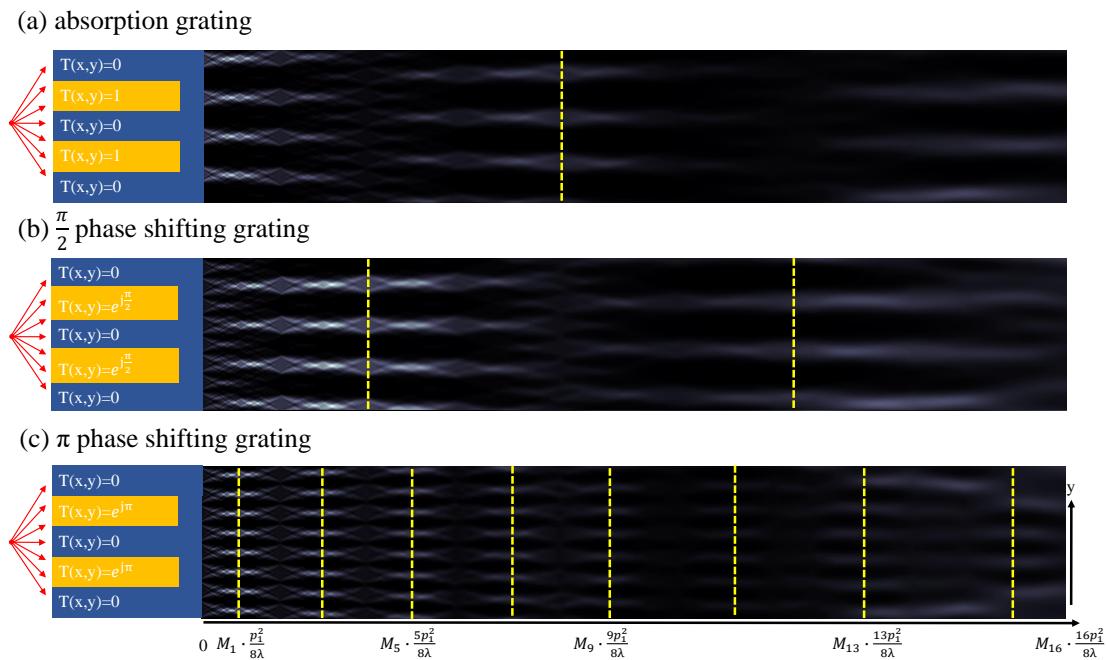


图 2.13 模拟 X 射线光机复色光球面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离光强分布 (Talbot 光毯)，光源尺寸  $5 \mu\text{m}$ ，光源与光栅  $G_1$  距离  $R=1.1\text{m}$ ，光栅周期  $5 \mu\text{m}$ 。（a）吸收光栅，（b） $\frac{\pi}{2}$  相位光栅，（c） $\pi$  相位光栅。

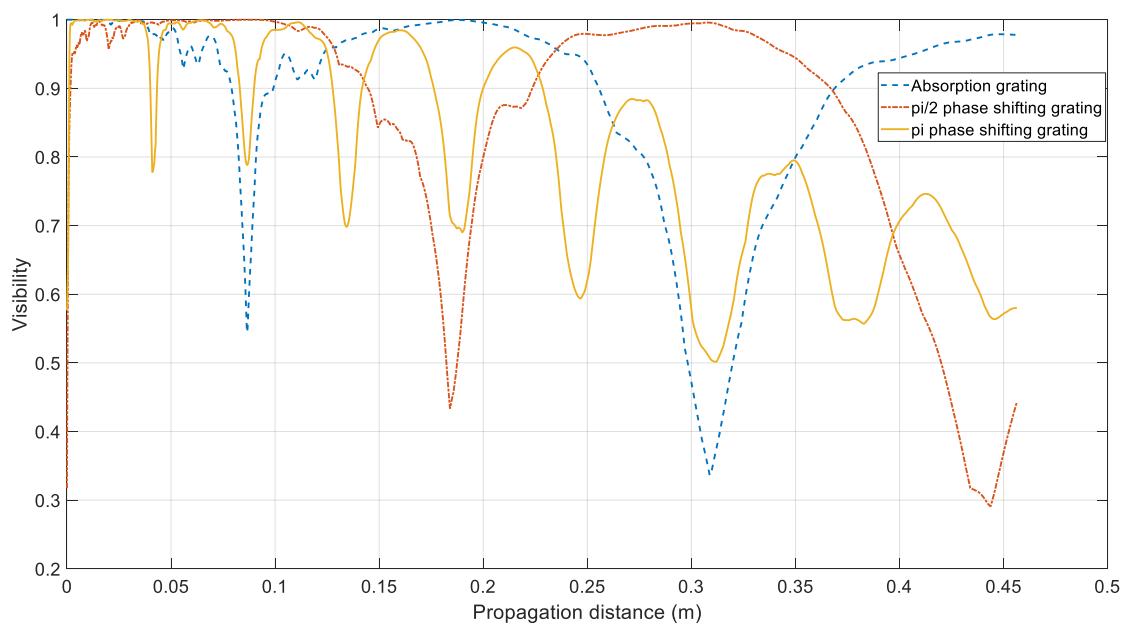


图 2.14 复色平面波照射下，三种衍射光栅  $G_1$  下游不同距离处可见度分布。

## 2.4 PMMA 小球相衬成像模拟

本节模拟了一个 PMMA 小球，放置于微焦点 X 射线光源与相位光栅之间，并考虑时间相干性与空间相干性的情况下，模拟利用 Talbot 自成像效应的相衬成像。

点光源 X 射线照射时，样品前的球面波函数为  $U_0(x_1, y_1)$ ，PMMA 小球的透过率函数为：

$$T_1(x_1, y_1) = \exp \left[ - \left( \frac{u_{pmma}}{2} + i \frac{2\pi\delta_{pmma}}{\lambda} \right) \times P(x_1, y_1) \right], \quad (2.29)$$

其中  $\lambda$  为波长， $u_{pmma}$  为 PMMA 材料的线吸收系数， $\delta_{pmma}$  为 X 射线在 PMMA 材料传播折射率的折射项， $P(x_1, y_1)$  为 PMMA 的厚度轮廓方程。

则 X 射线穿过 PMMA 小球后的波函数  $U_2(x_2, y_2)$  可以表达为

$$U_2(x_1, y_1) = U_0(x_1, y_1) \times T_1(x_1, y_1). \quad (2.30)$$

PMMA 与相位光栅之间的距离为  $z_1$ ，则相位光栅之前的波前  $U_3(x_3, y_3)$  可以用 Fresnel 衍射积分计算，采用基于传递函数的 Fresnel 传播计算方法，参照公式1.49可得

$$U_3(x_2, y_2) = \text{FFT}^{-1} \left\{ \text{FFT} \left\{ U_2(x_1, y_1) \right\} \times H(f_x, f_y) \right\}. \quad (2.31)$$

$H(f_x, f_y)$  离散化的传递函数  $H[f_m, f_n]$  可以表达为

$$H[f_m, f_n] = e^{j k z_1} \exp \left[ -j \frac{2\pi^2}{k} z_1 \left( \frac{f_m^2}{M^2 \Delta x_2^2} + \frac{f_n^2}{N^2 \Delta y_2^2} \right) \right], \quad (2.32)$$

其中  $(f_m, f_n)$  是离散傅里叶变换的频率分量的索引。

使用周期为  $5 \mu\text{m}$  的  $\pi$  相位光栅，其透过率函数为

$$T_2(x_2, y_2) = \begin{cases} 1 & 0 \leq (y_0 \bmod p) < \gamma p \\ A \exp[i\pi] & \gamma p \leq (y_0 \bmod p) < p \end{cases}. \quad (2.33)$$

其中  $A$  为材料考虑材料对 X 射线吸收后的振幅。

则相位光栅后的光场函数  $U_4(x_2, y_2) = U_3(x_2, y_2) \times T_2(x_2, y_2)$ 。再利用公式1.49，计算  $U_4(x_2, y_2)$  波前传播至 5 阶 Talbot 距离  $Z_N$  处的自成像光场  $U_5(x_3, y_3)$ 。吸收光栅的透过率函数为  $T_3(x_3, y_3)$ 。则 X 射线穿过吸收光栅的波前分布  $U_6(x_3, y_3) = U_5(x_3, y_3) \times T_3(x_3, y_3)$ 。

X 射线强度分布  $I(x_3, y_3)$  可以表达为

$$I(x_3, y_3) = |U_6(x_3, y_3)|^2. \quad (2.34)$$

X射线光栅干涉仪装置的性能效率取决于许多参数。可见度是评估X射线光栅干涉仪设置的重要参数，并且与装置的效率直接相关。基于可见度定义<sup>[46,72]</sup>:

$$V = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}, \quad (2.35)$$

其中  $I_{max}$  和  $I_{min}$  是干涉图样的强度的最大值和最小值。

下面模拟半径为 30 μm 的 PMMA 小球相衬成像，相位光栅周期为 5.366 μm，吸收光栅周期为 3 μm。其图像如图2.15所示。考虑空间相干性，点光源空间尺寸大小为 5 μm，点光源与相位光栅距离为 1.1 m；考虑时间相干性，点光源中心波长能量为 8 keV，带宽 10%。

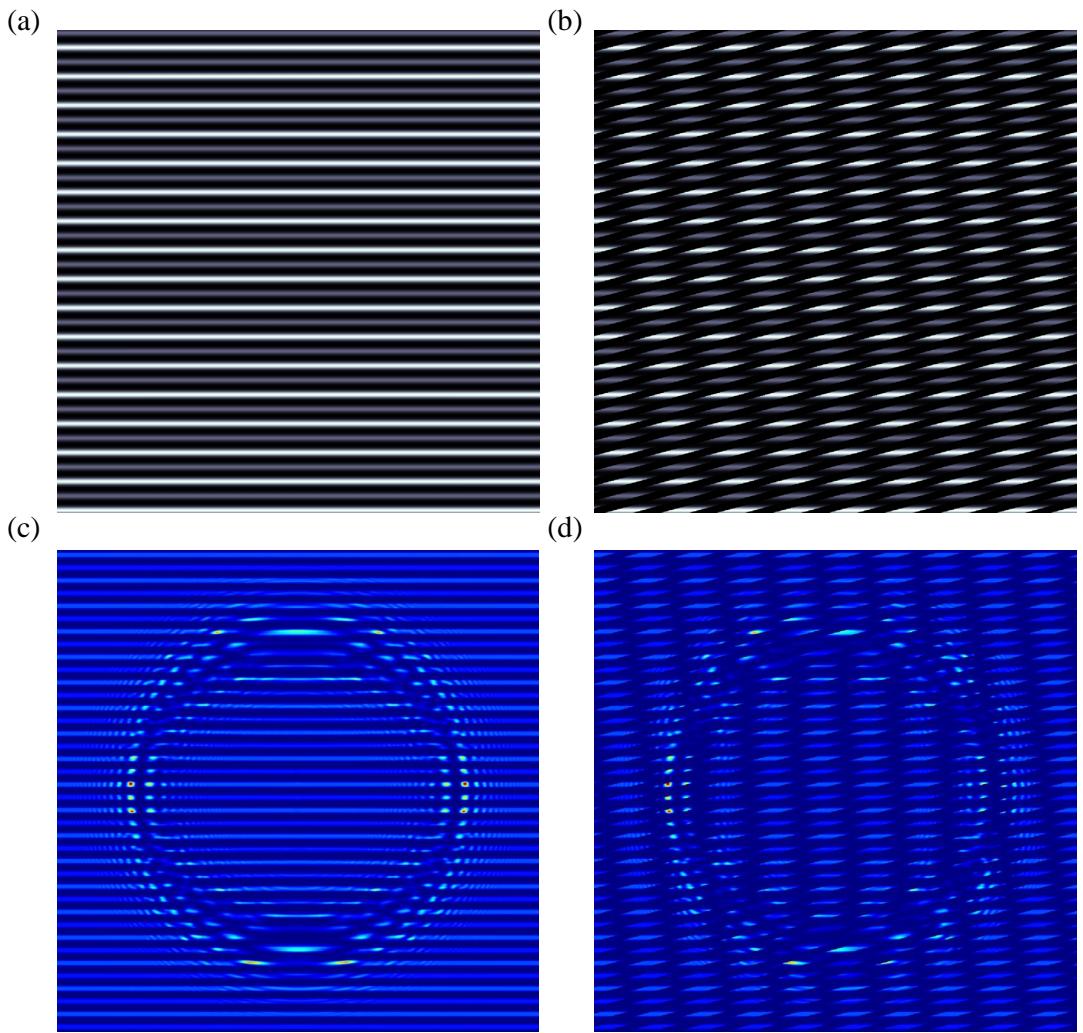


图 2.15 相衬成像模拟。(a) 无 PMMA 小球时相位光栅在 5 阶 Talbot 距离处的自成像条纹，(b) 加入吸收光栅后形成 Moiré 条纹，(c) 由半径为 30 μm PMMA 小球是相位光栅在 5 阶 Talbot 距离处的自成像条纹，(d) 加入吸收光栅后形成 Moiré 条纹。

从仿真结果看，微焦点光源在 5 阶 Talbot 距离处具有很好的图像可见度，但是光栅周期较小，相位移动很难被 X 射线探测器检测，加入吸收光栅后可以看到大周期清晰的 Moiré 条纹，如图2.15(b)。当放入 PMMA 小球时，会导致 X 射线波前畸变，产生扭曲的干涉条纹，如图2.15(c)，但是干涉条纹依然难以被 X 射

线探测器检测到，加入分析光栅后，可以清晰的看到 Moiré 条纹发生扭曲，如图2.15(c)，通过傅里叶分析技术可以很方便求出不同位置的相位变化，进而计算出物质内部结构分布，这也是 X 射线相衬成像的原理。

实际上，该微焦点 X 射线光栅干涉仪在 9 阶 Talbot 距离处依然有大于 70 % 的干涉条纹可见度，但实际情况需要考虑光强较弱、空气吸收，探测器噪声以及光栅制造误差等，可见度会下降。

引入吸收光栅会放大相位移动信号，但同时也会带来光子利用效率低的问题，在微焦点光源上需要更长时间的曝光，此时需要低探测器噪声才能保证较好的图像质量，或者采用光子计数相机，无光电转换噪声，提高系统的信噪比。

在考虑实际可见度时，还需要考虑 X 射线探测器转换效率、X 射线光源强度、像素尺寸、空气吸收衰减，光栅制造误差等因素，实际采集到的图像条纹可见度相比较理论模拟图会有明显下降。

## 2.5 微焦点X射线光栅干涉仪的波前传感与面形测量原理

光栅干涉仪是一种具有极高灵敏度的波前传感技术<sup>[3]</sup>，最高可达10 nrad量级，可定量测量X射线波前畸变。为了支撑高性能光源波前调控与先进实验技术开发，并在工作波长下实现实验室级面形测量，本文拟搭建微焦点X射线光栅干涉仪实验平台。X射线波前传感原理如图2.16(a)所示。微焦点X射线光栅干涉仪由作为分束器的相位光栅G<sub>1</sub>作为检测器透射掩模的吸收光栅G<sub>2</sub>和X射线相机组成。由式2.5可知，球面光束的干涉图样锥形光束在下游形成周期性的干涉条纹。在X射线从反射镜表面掠入射后，相位光栅下游的周期性干涉图案(Talbot自成像)因反射镜表面斜率误差导致波前畸变产生相移。由于干涉图案周期较小，故常规X射线相机不能分辨出相移信号，通过增加吸收光栅G<sub>2</sub>可以放大相移信号。采用相位步进技术或者傅里叶分析技术可以解析出条纹相位和波前曲率半径分布，进而计算出波前角度(相位梯度)和镜面斜率误差分布<sup>[78]</sup>。

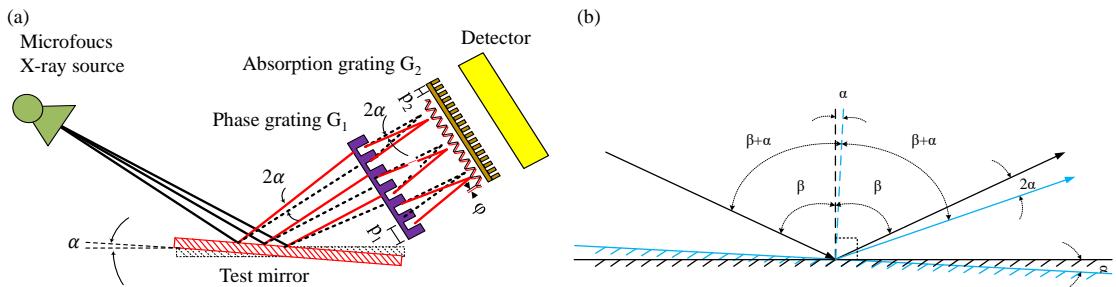


图2.16 X射线波前传感原理图。(a)微焦点光栅干涉仪面型测量原理图，(b)反射镜表面斜率误差与波前传播角度关系

如图2.16(a)所示，波前的扰动会使这些干涉条纹失真，这会导致干涉图案的偏移，移动距离s的表达式<sup>[77]</sup>为

$$s = 2\alpha \cdot Z_N, \quad (2.36)$$

式中：2α是测试镜中反射角的变化，如图2.16(b)所示，其中β为入射角。干涉图样的偏移可以用弧度表示为<sup>[79]</sup>

$$\delta = 2\pi \cdot s/p_1^*. \quad (2.37)$$

受到镜面反射的影响，当入射角不变，镜面斜率误差为α时，出射角度相对于原来的角度增大2α。对于锥形光束，反射角2α与分析光栅平面对应的相位移动量φ的关系为<sup>[80]</sup>

$$2\alpha = \varphi \times \frac{p_1^*}{2\pi \times Z_N}. \quad (2.38)$$

因此，可以得到镜面斜率误差与吸收光栅平面对应的条纹相位移动量φ的关系为

$$\alpha = \varphi \times \frac{p_1^*}{4\pi \times Z_N}. \quad (2.39)$$

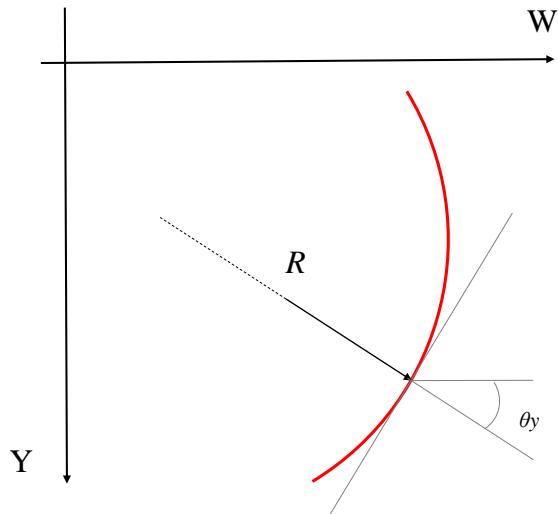


图 2.17 波前分布与波前传播角关系示意图

定义一束光的波前分布为  $W$ , 则波前的相位分布为  $\phi = \frac{2\pi}{\lambda}W$ , X 射线沿着垂直于波前表面的方向传播, 其几何关系如图2.17所示, 波前传播角  $\theta(\theta = 2\alpha)$  与光束的相位梯度关系如下:

$$\begin{cases} \theta_x = \frac{\partial W_x}{\partial x} = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \\ \theta_y = \frac{\partial W_y}{\partial y} = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\partial \phi(y)}{\partial y} \end{cases} \quad (2.40)$$

因此, 将波前角度分布分别在 X 和 Y 方向上积分就可以得到波前分布。波前分布函数的一阶导数是波前传播角度分布, 二阶导数是曲率, 也即曲率半径的倒数。因此波前的传播角可以通过沿 X 和 Y 方向积分曲率半径的倒数  $R^{-1}$  来恢复, 如下所示:

$$\begin{cases} \theta_x = 2\alpha_x = \int_0^x R^{-1}(x)dx \\ \theta_y = 2\alpha_y = \int_0^y R^{-1}(y)dy \end{cases} \quad (2.41)$$

镜面表面轮廓可以表达为镜面斜率误差沿镜体子午或弧矢方向的积分<sup>[81]</sup>:

$$h_z = \int \frac{\theta}{2} dz \quad (2.42)$$

## 2.6 小结

本章主要介绍了光栅干涉测量原理, 首先介绍光栅干涉仪工作原理包括整数 Talbot 效应与分数 Talbot 效应, 球面波照明对干涉仪影响, 分析光栅结构对衍

射效率影响，结果表明分数 Talbot 效应是强度自成像，分数 Talbot 距离干涉仪 X 射线探测器能采集图像的距离， $\pi$  相位光栅  $\pm 1$  级衍射效率最高，对空间相干性要求更低。

接着介绍了部分相干光对光栅干涉仪的影响，模拟了单色平行光、复色平行光，同步辐射点光源复色光与 X 光机点光源复色光的 Talbot 光斑，结果表明空间相干性对光栅干涉仪影响更大，但较长的传播距离可以改善空间相干性，因此同步辐射光源比 X 光机在相同源尺寸下有更好的条纹衬度。时间相干性上，波长带宽在 10% 是影响不大。随后分析了模拟 PMMA 小球相衬成像结果，证明本系统设计可以获得很好的图像可见度，在微焦点光源照明下，最高到 9 阶 Talbot 距离处，依然有 70% 以上的条纹可见度。然后将该参数确定为实验系统参数。

最后分析了光栅干涉仪用于面形测量的原理，给出了镜面斜率误差和表面轮廓的计算公式。

## 第3章 光栅干涉仪平台搭建与实验技术

### 3.1 系统简介

该装置主要由 X 光机、光阑、压弯镜、相位光栅、吸收光栅和 X 射线探测器组成。X 光机发出锥形光束，在 X 光源后是光阑装置，光阑装置主要为平移台上面安装铅块，中间留有 1 mm 圆孔，其作用主要是过滤其它方向的杂散光，只让中心锥形光束透过。以上所有装置都固定在一个光学平台上，铅房为上下结构，上半部分为铅防护区域，放置光学测量系统，尺寸为  $2600 \times 800 \times 1070$  mm，可使用射线源最高管电压为 100 kV；下半部分尺寸为  $2600 \times 800 \times 800$  mm，放置平移台的驱动器和电缆等设备，并通过在另一间实验室的控制台进行实验。

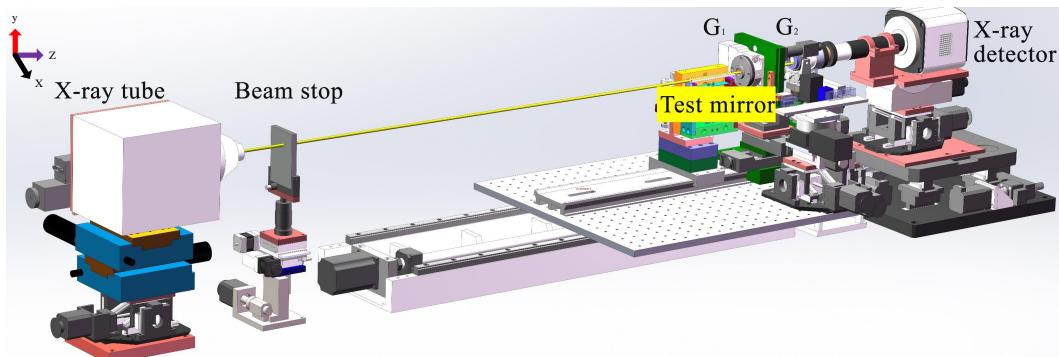


图 3.1 微焦点 X 射线光栅干涉仪三维设计图，该装置主要包括 X 光机、光阑、压弯机构、相位光栅、分析光栅和 X 射线探测器。

#### 3.1.1 机械系统设计

机械部件主要包括主体框架、各分部精密平移与旋转台等。在该高分辨 X 射线波面检测系统中，为了满足两块光栅的对准要求，各个器件平移台有如下的自由度。光源装置：X、Y 轴平移，绕 X 轴旋转；光阑装置：X、Y、Z 轴平移；相位光栅装置（6 维）：XYZ 轴平移和绕 XYZ 轴旋转；吸收光栅装置（5 维）：X、Y、Z 轴平移和绕 X、Y 轴旋转；CCD 探测器：X、Y、Z 轴平移和绕 X 轴旋转，图3.2为 X 射线光栅干涉仪实验装置。

#### 3.1.2 光学器件与探测器

考虑到光源时间相干性与空间相干性<sup>[35]</sup>，我们采用焦点最小为  $5 \mu\text{m}$  的微焦点光源。

X 射线光源来源于日本滨松光子学株式会社 (HAMAM ATSU 型号：L9421-02)，如图3.3(a)，其为密封型 X 光源，冷却方式为内部的对流冷却，固定钨靶，锥

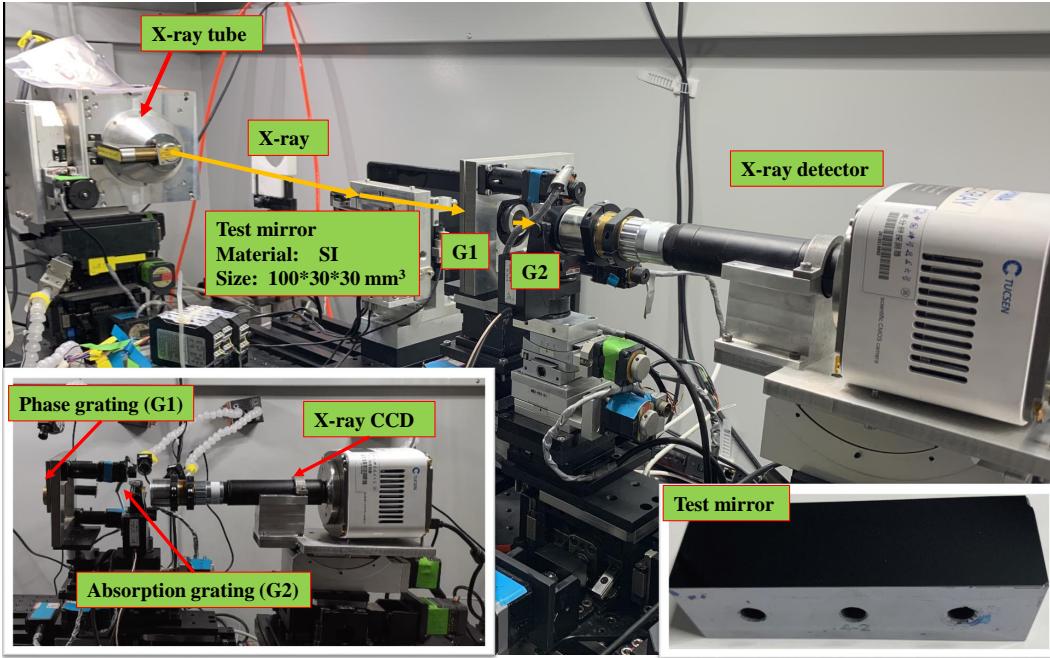


图 3.2 微焦点 X 射线光栅干涉仪三维设计图，该装置主要包括 X 光机、光阑、压弯镜与压弯机构、相位光栅、吸收光栅和 X 射线相机。

束照明，X 光束锥角为  $39^\circ$ 。最大可输出功率为 8 W，在最大功率限制下，管电压运行范围分别为 20 kV~90 kV，管电流为  $10 \mu\text{A} \sim 200 \mu\text{A}$ 。光源焦斑半径为  $7 \mu\text{m}$ ，并在输出功率为 4 W 时达到最小，为  $5 \mu\text{m}$ 。实验设计能量为 8 keV，具有钨靶 X 光机在此能量周围提供相当高的光通量，并使用  $17 \mu\text{m}$  厚的镍来减少光源多色照射的影响。

本系统中使用的  $\pi$  相位光栅以及吸收光栅都为 Microworks precision structures 公司加工，如图3.3(b)，相位光栅周期为  $5.366 \mu\text{m}$ ，分析光栅周期为  $3 \mu\text{m}$ ，由在聚酰亚胺基板上电镀金制造而成。两光栅的扫描电镜图片如图3.3(d) 和 (e) 所示。两光栅参数见表3.1。

表 3.1 相位光栅与分析光栅设计参数

类型	相位光栅	吸收光栅
Period	$5.366 \mu\text{m}$	$3 \mu\text{m}$
Duty	0.5	0.5
Area	15 mm round	$> 10 \times 10 \text{mm}^2$
Height	$18.4 \mu\text{m} \pm 10\%$	$> 20 \mu\text{m}$
Material	Epoxy	Gold
Substrate	polyimide membrane $5\text{-}10 \mu\text{m}$	polyimide membrane $5\text{-}10 \mu\text{m}$

X 射线探测器来源于美国 SIGRAY 公司（后端制冷相机型号：Dhyana 400D，如图3.3(c)）。高分辨探测器主要分为三部分，第一部分是闪烁晶体 CSI，X 射线通过闪烁晶体，变成可见光；第二部分是可见光消色差物镜，具有  $4 \times$  的放大；第三部分制冷相机，工作室温度为  $-9^\circ\text{C}$ ，CMOS 像素大小为  $11 \mu\text{m}$ ，像素数为  $2048 \times 2048$ ，USB 3.0 接口传输，图像采集速度最高为 30 帧/秒，数据读出位数为

32 bit。

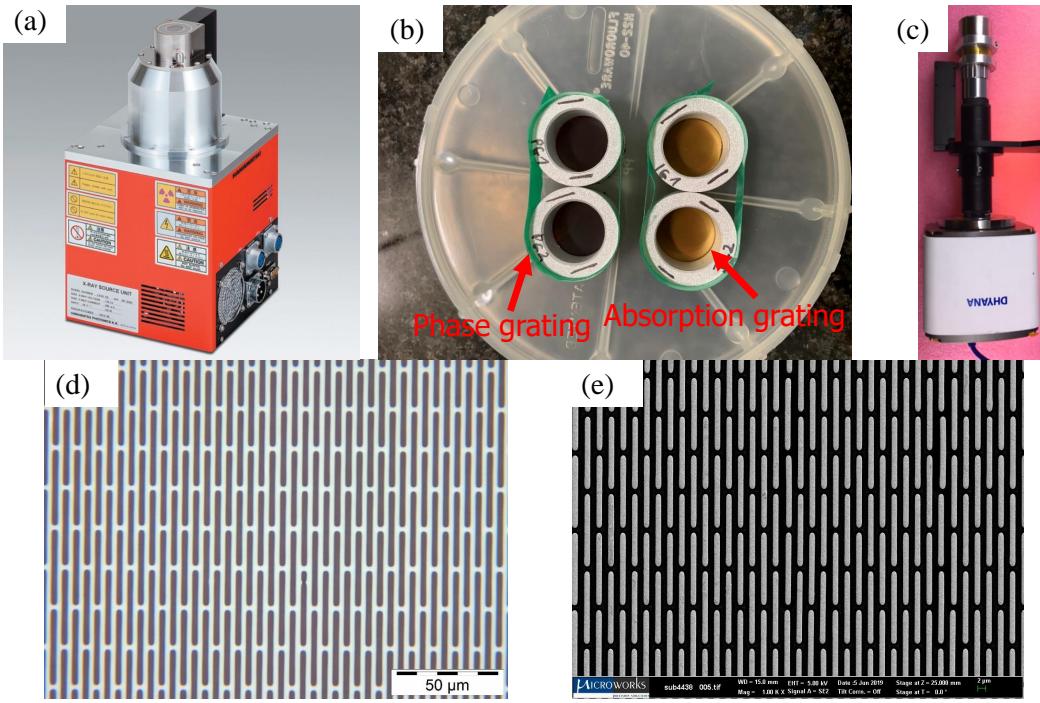


图 3.3 X 射线光栅干涉仪主要光学器件与探测器：(a) 微焦点 X 射线光源，(b) 相位与吸收光栅，(c)X 射线探测器，(d) 相位光栅 SEM 图片，(e) 吸收光栅 SEM 图片。

### 3.1.3 控制系统设计

如图3.4所示为高分辨 X 射线波面检测系统的框架图，从框架图可以看出，系统分为光机系统，监控系统与控制系统。其中光机系统为之前介绍的干涉仪装置。

监控系统可以实时观察实验进程，包括压弯镜装置的控制，精密平移台的控制等等。驱动器部分如图3.5(b) 所示，数十个驱动器驱动步进电机，实现多自由度的控制。驱动器接收来自控制台的脉冲信号，实现对电机的步进控制。

电机驱动器部分与步进电机控制面板通过电线连接，在步进电机控制面板通过脉冲信号控制精密平移台移动。监控面板与铅房中的摄像头通过同轴电缆连接，摄像头视频信号传输到监控显示器。

控制台部分如图3.5所示，控制台分为监控面板，步进电机控制面板以及图像采集及光源通信工控机。监控系统、电机驱动器、X 射线光源与 X 射线探测器分别采用同轴电缆、航空插头、RS232 与 USB 3.0 连接。

用于机械式相位步进的高精度压电平移台，连接至 PI 的压电驱动器，驱动器由数模转换器提供模拟量输入，数模转换器可通过 USB 接口连接到上位机，在控制台上即可控制步进扫描。压弯机构的直线步进电机与本身的驱动器相连，再通过 USB 接口与工控机相连。位移传感器与传感器显示器相连，这样可以同时

实现远程控制，并可以实时通过显示器上的数值变化观察位移的变化。

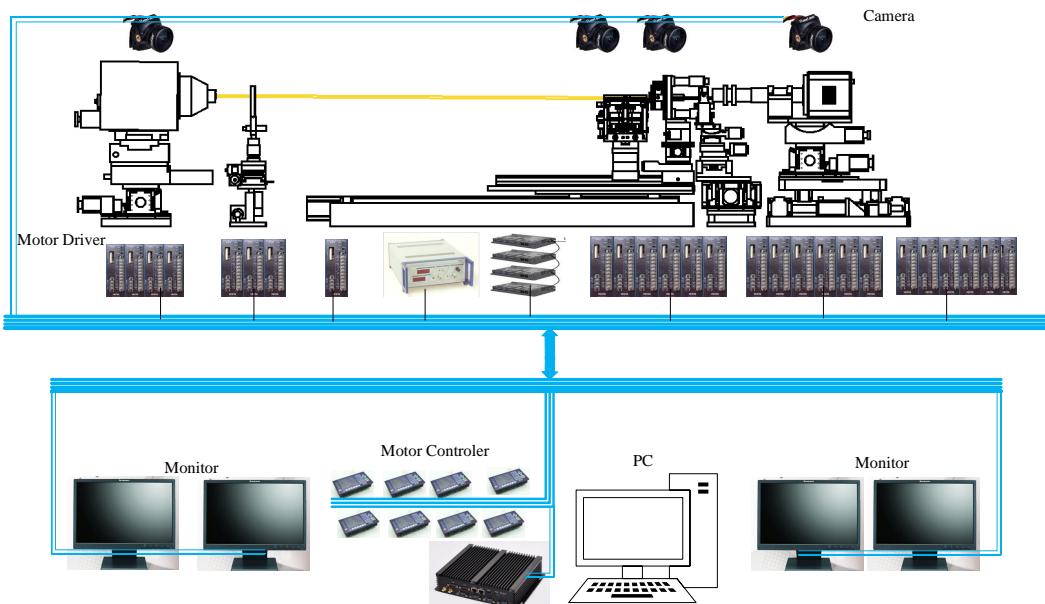


图 3.4 微焦点 X 射线光栅干涉仪运动控制系统架构图

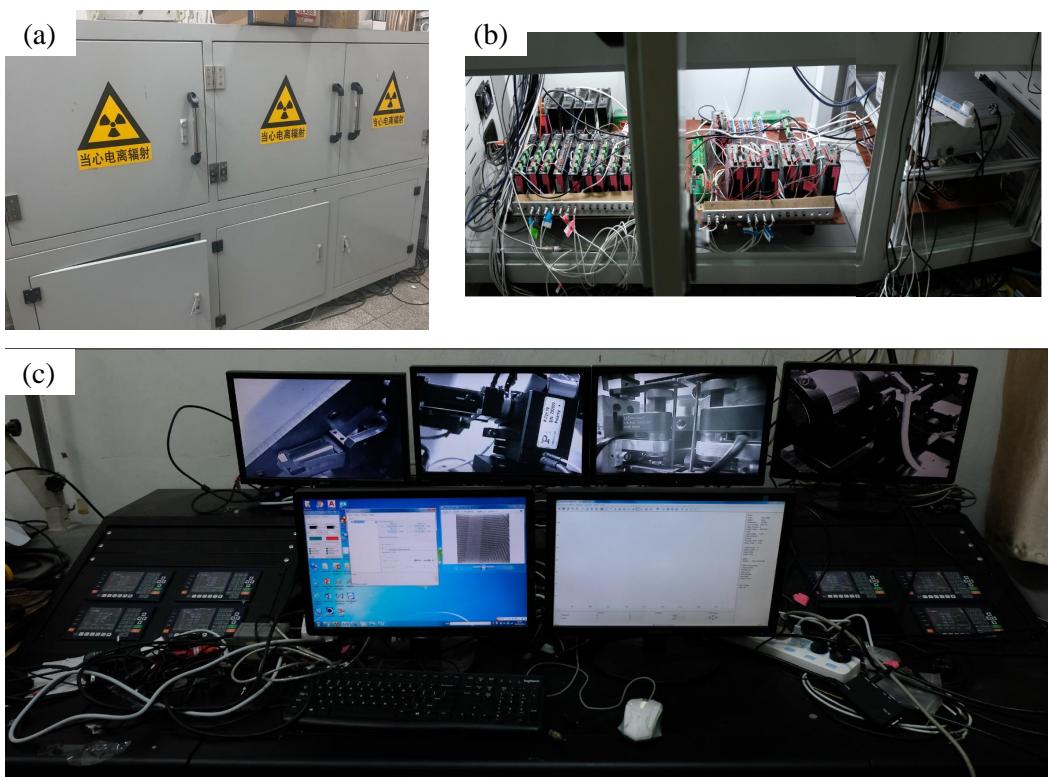


图 3.5 实验装置外部结构。(a) 实验铅房, (b) 控制器放置于铅房下半部分, (c) 控制台。

### 3.1.4 相位步进压电平移台

本课题需要用机械式相位步进扫描提取相位，需要在吸收光栅  $3 \mu\text{m}$  周期内扫描三步及三步以上，一个周期最少四个采样点，因此每步步长最少为  $250 \text{ nm}$ 。精细扫描时需要十步及以上，需要百  $\text{nm}$  级步长扫描。

相位步进压电平移台选择的是德国 PI 公司的高动态 PIFOC 物镜扫描器 P-721.CLQ，扫描器具有平行柔性铰链结构，利用铰链导向可以实现高分辨率的光栅步进扫描，分辨率为  $0.7 \text{ nm}$ ，行程为  $140 \mu\text{m}$ ，线性误差大小可达到  $0.03\%$ ，重复位置精度可达到  $\pm 5\text{nm}$ ，扫描器刚度为  $0.3 \text{ N}/\mu\text{m}$ ，最大负载可负载  $100 \text{ N}$ ，此压电平移台满足课题中对于相位步进的要求，压电平移台如图3.6所示。

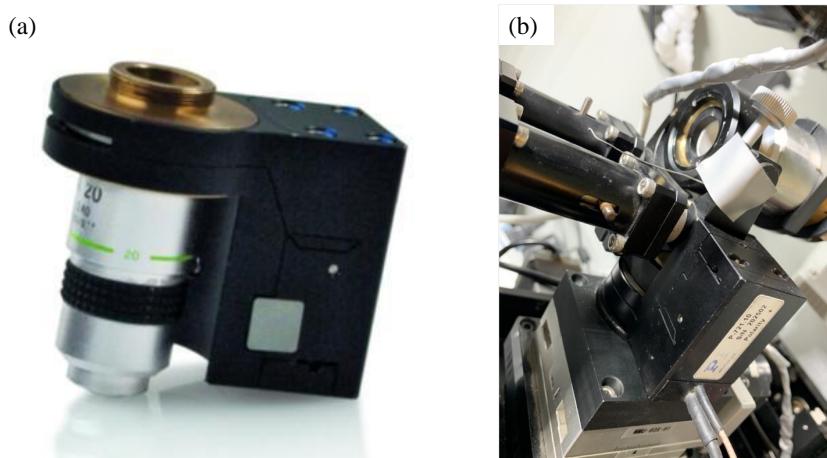


图 3.6 相位步进压电平移台。(a) 高动态 PIFOC 物镜扫描器实物图, (b) 吸收光栅与压电平移台装配。

## 3.2 系统设计

### 3.2.1 关键参数

在该系统中，我们通过调整距离，可以使用不同 Talbot 阶数来进行实验。作为  $S$  是装置的总长度， $S = R + Z_N$ ， $l_s$  是从光源到压弯镜中心的距离。 $R$  是发散光束的曲率半径。 $Z_N$  是分数 Talbot 距离。

表 3.2 微焦点 X 射线光栅干涉仪系统设计参数。

Talbot order	$E(\text{keV})$	$l_s(\text{mm})$	$R(\text{mm})$	$p_1(\mu\text{m})$	$Z_N(\text{mm})$	$M$	$p_2(\mu\text{m})$
5	8	1050	1100	5.366	129.8	1.118	3
3	8	609.3	659.3	5.366	77.9	1.118	3
1	8	169.8	219.8	5.366	26.0	1.118	3

如表3.2所示，我们分别设计了一、三、五阶 Talbot 距离下不同器件之间距离。这些不同阶次可以共用一套光栅，只要保证放大倍数  $M$  相同即可。

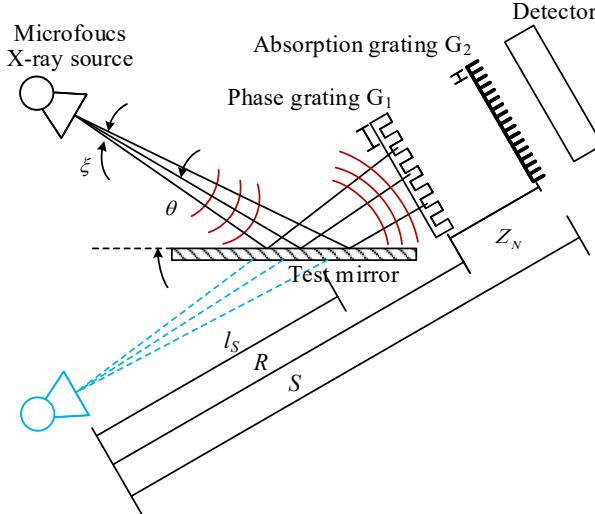


图 3.7 光栅干涉仪系统原理图。

### 3.2.2 角度灵敏度

根据公式2.39，采用相位步进的前提下，灵敏度（最小可探测折射角）正比于最小可探测干涉条纹相位移动量<sup>[82-83]</sup>：

$$\Delta\alpha_{min} = \Delta\varphi_{min} \times \frac{p_1^*}{4\pi \times Z_N} \quad (3.1)$$

相位步进模式下理想相位检测灵敏度可以达到  $1/150$  周期，即最小可探测干涉条纹相位移动量为  $2\pi/150$ 。可以计算各阶次理论最小波前角度探测灵敏度，当使用 5 阶 Talbot 距离时，理论可以获得 77 nrad 的面形测量角度灵敏度，优于 100 nrad，实际各阶次最小波前角度探测灵敏度与相位步进曲线的可见度和光子数有关，其取决于 X 射线探测器效率，像素尺寸，空气吸收，光栅制造误差，横向与纵向相干性以及相位步进数等<sup>[84]</sup>，实际实验角度灵敏度测量将在4.2.1介绍。

### 3.3 系统校准

利用微焦点 X 射线光栅干涉仪装置进行波前表征与光学计量，对于系统的装调、校准精度，以及数据图像采集过程中机械稳定性的要求非常高。实验中参考国内外优秀经验<sup>[69,85-86]</sup>，总结出一套符合 X 射线光栅干涉仪面形测量的实验方法。

#### 3.3.1 器件中心对准

首先利用高度测量设备，将 X 射线光源的中心，探测器中心，相位与吸收光栅，光阑与镜面调整至同一高度，再将激光器放在光轴线上，调整各器件在 XY 平面的位置使激光器发出的光依次穿过其中心位置。

#### 3.3.2 光栅对准

在光栅干涉仪系统中，光栅的对准是最为重要以及复杂的工作，只有在光栅对准的情况下，才能保证接下来采集图像的准确性

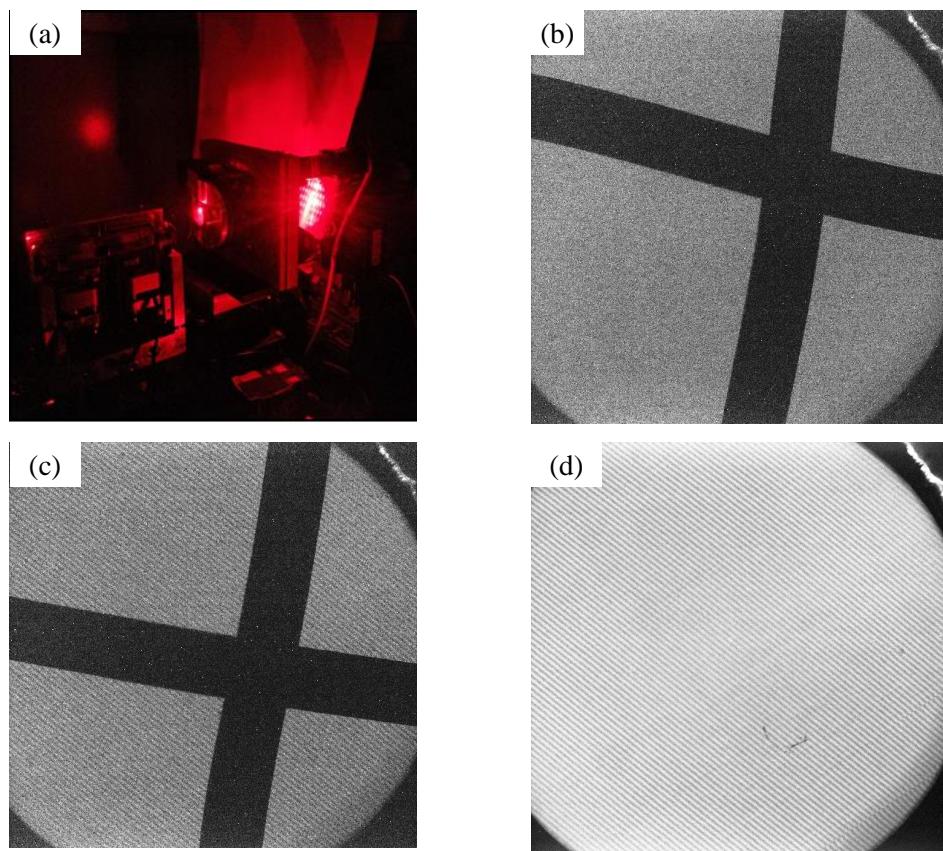


图 3.8 光栅对准。(a) 激光通过光栅后的衍射图样，(b) 金属丝成像，(c) 金属丝与 Moiré 条纹，(d) 移除金属丝后 Moiré 条纹。

首先需要使用激光器将相位光栅和分析光栅预对准。通过观察光栅的衍射图案，使两个光栅刻线大致平行，以便于后续利用 Moiré 条纹进行精细调整。如

图3.8(a)是激光器照射时相位光栅衍射图案，其 $\pm 1$ 级衍射斑连线垂直于光栅刻线方向。

在进行 Moiré 条纹对准时，需在光栅前固定十字交叉的金属丝，再打开 X 光机后通过 X 射线探测器观察，平移光栅位置使金属丝交点大概平移到视场中心，此时固定光栅在 XY 平面位置，如图3.8(b)。然后在 Z 轴方向旋转相位光栅 G1，每次旋转固定步数，如条纹越来越密集，条纹周期越小，则说明光栅之间夹角越来越大；反之条纹越来越稀松，条纹越大，则光栅之间夹角越来越小，如图3.8(c)所示。分析光栅 G2 作为相位步进的光栅，只需要调整好刻线方向，使之平行于成像平面，并使其中心处于在 CCD 视场中心位置，即可固定位置，不需要进行大幅度的调整。

然后移除金属丝，在 Z 轴方向分数 Talbot 距离附近移动吸收光栅，找到条纹具有最大衬度的位置处，此时即为真实分数 Talbot 距离，此时探测器采集到图像如图3.8(d) 所示。若此时继续缩小相位光栅与分析光栅夹角，Moiré 条纹周期将变大，直至消失在探测器平面。我们在第二章中知道 Moiré 条纹的周期与光栅刻线间的夹角有关：

$$p_m = \frac{p/2}{\sin \theta} \approx \frac{p}{2\theta}。 \quad (3.2)$$

在光栅对准过程中，相位光栅与吸收光栅不平行、Z 轴方向距离不匹配等因素都会在探测器上看到不同的扭曲 Moiré 条纹图案，如图3.9所示，本文仿真了不同光栅对准误差影响下 Moiré 条纹的图案，对于实际实验具有指导意义。



图 3.9 不同误差下 Moiré 条纹对比图。(a) 理想状态相位光栅与吸收光栅刻线平行于 X 轴，(b) 相位光栅沿 Z 轴旋转，(c) Z 轴偏移，即两光栅间距不在分数 Talbot 距离处，(d) 相位光栅在沿 X 轴倾斜误差，(e) 相位光栅在沿 Y 轴旋转误差。

图3.9(a)显示当相位光栅与吸收光栅在 XY 平面上完全平行时，二者光栅刻线方向都平行于 X 轴，视场内无条纹，像素点成均匀地亮度分布，此时进行相位步进时，亮度会有变化；图3.9(b)显示当其中一个光栅绕 Z 轴旋转较小角度时，会看到较大周期清晰的 Moiré 条纹；图3.9(c)显示当两光栅间距不在 Talbot 处时，即在 Z 轴上二者位置有偏移，会看到横向条纹，且条纹分布是均匀的；图3.9(d)显示当相位光栅有绕 X 轴的倾斜误差时，也会形成横向条纹，但此时横向条纹分布不均匀；图3.9(e)显示当相位光栅有绕 Y 轴的倾斜误差时，会出现扭曲的条纹，此时需要旋转 Y 轴调节光栅倾角。

### 3.3.3 探测器校准

X射线探测器在采集图像前需要进行暗场与平场校准。校准步骤如下：

(1) 关闭X射线光源，关闭屋内所有灯光，并用黑布盖住整个X射线探测器，防止有可见光从接口缝隙中到达制冷相机感光元件上。此时采集100张与实验时相同规格（曝光时间，尺寸）的图像。做平均后保存为暗场图像  $I_{dark}(m, n)$ 。

(2) 打开X射线光源，调整至实验需要的电压与电流。等到光源点稳定15分钟后，移除系统中所有光学器件，让X光机发出的光直接照射到探测器表面，采集100张图像，做平均后保存为图像  $I_{flat}(m, n)$ 。

其中  $m, n$  是采集到图像的像素坐标。当再次采集实验图像  $I_a(m, n)$  时，校正后的图像为  $I_c(m, n)$ ：

$$I_c(m, n) = \frac{[I_{a(m,n)} - I_{dark}(m, n)]}{M \times N \times [I_{flat}(m, n) - I_{dark}(m, n)]} \times \sum_{m=0, n=0}^{m=M, n=N} [I_{flat}(m, n) - I_{dark}(m, n)] . \quad (3.3)$$

本文基于Matlab平台开发了图像采集与数据处理软件，集成了探测器校正、图像滤波、周期计算等。

## 3.4 小结

本章主要介绍了微焦点X射线光栅干涉仪光机电系统的搭建与相关校准和实验技术。设计了系统总体机械模型，完成关键器件在物理参数上的设计。其次通过物理参数选择实验器材，包括光源、光栅、探测器等等装置在内，搭建了系统总体装置，完成其整体机械设计、加工和安装调试；控制系统电路设计、焊接与装配；图像采集上位机软件编写、调试；监控系统设计与装调，并确定了系统总体参数，包括光源、光栅、探测器等，并进行了系统角度灵敏度分析。

总结一套X射线光栅干涉仪面形测量实验技术，重点分析了光栅对准及调节技术，模拟了不同对准误差下Moiré条纹形状变化，对于实验具有指导意义。

## 第4章 光栅干涉仪波前表征实验方法

光栅干涉仪可以在 Moiré 条纹分析模式或相位步进模式下工作。本章首先介绍对平面镜面形测量时，采用机械式相位步进和 Moiré 计量方法方法用于相位提取，重建波前角度分布与镜面斜率误差分布；然后介绍了电磁式相位步进方法用于相位恢复，并对比了三种不同方法的优劣。最后对压弯镜的面形变化进行了测量。

### 4.1 Moiré 分析方法

#### 4.1.1 Moiré 效应

Moiré 条纹图像的直接分析是相位步进分析的替代方法。其主要优点是可以从单个图像中提取所有信息，从而可以在 X 射线自由电子激光器等脉冲源上进行快速成像和单次实验。此外，它不需要相位步进中的纳米级精度平移台。缺点是图像分析比较困难，并且 Moiré 条纹空间分辨率较低。图4.1模拟了周期为 3  $\mu\text{m}$  的一维光栅与二维棋盘格光栅的自成像，与周期也为 3  $\mu\text{m}$ 、旋转 5° 的吸收光栅形成 Moiré 效应。在图4.1 (c) 与 (d) 中可以看到，Moiré 条纹的周期远大于光栅周期。

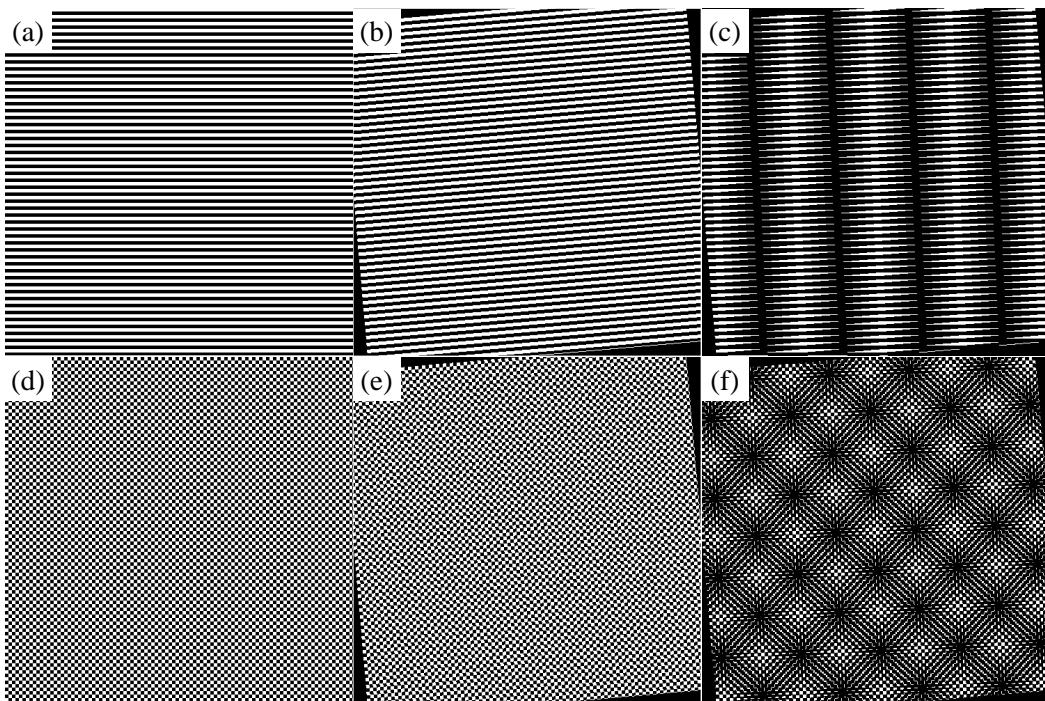


图 4.1 Moiré 条纹产生原理。(a) 一维光栅自成像，(b) 一维吸收光栅旋转 5°，(c) 一维光栅产生的 Moiré 条纹，(d) 二维光栅自成像，(e) 二维吸收光栅旋转 5°，(f) 二维光栅产生的 Moiré 条纹。

在2.1节中，图2.1也显示了畸变波前干涉条纹与分析光栅产生扭曲的 Moiré 条纹，Moiré 效应极大地放大了相位的信号，X 射线相机很容易分辨出比光栅周期长的 Moiré 条纹，逐行求解相位与相位解包裹可得到镜面沿纵向的斜率分布。傅立叶分析方法仅需要单幅图像即可求解出波前分布，非常适合于 X 射线自由电子激光等脉冲光源的波前检测。

#### 4.1.2 面形测量与波前表征

为了验证微焦点 X 射线光栅干涉仪反射镜面型测量的准确性，首先测量一块  $100 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 30 \text{ mm}$  的硅 (Si) 反射镜，在 Moiré 模式下，经过探测器校准、相位光栅与分析光栅粗对准（利用可见光激光器衍射对准），以及 Moiré 条纹对准后，探测器采集到实验图像结果如图4.2(a) 所示。探测器可以在一幅图像中同时获得反射光与直通光，在经过图像滤波去噪后如4.2(b) 所示

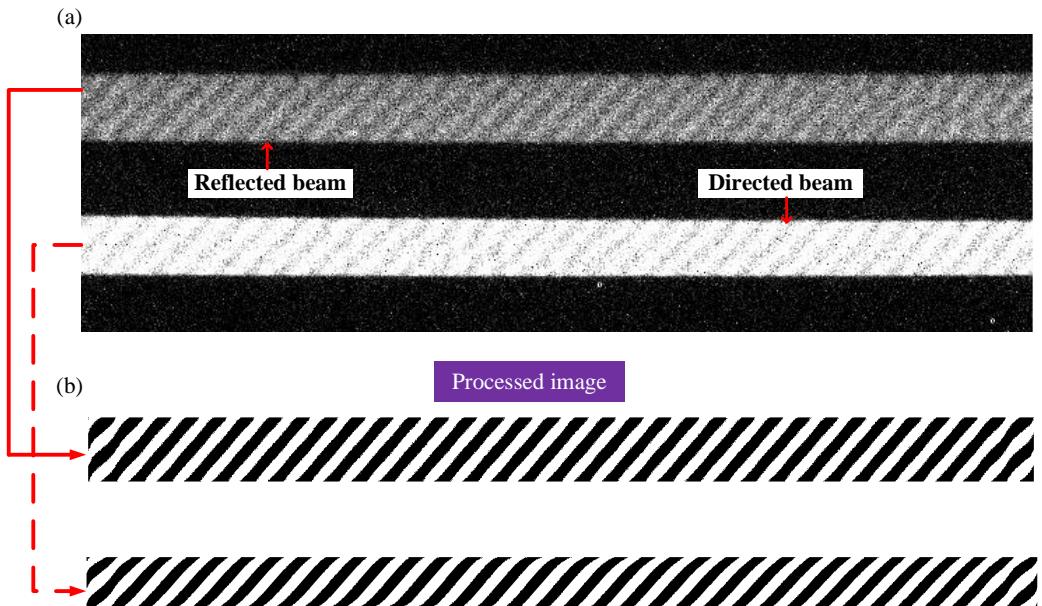


图 4.2 Moiré 模式下探测器记录的图像。(a) 原始图像；(b) 滤波后图像

下游的干涉条纹强度分布  $I_1(x, y)$  可以表达为

$$I_1(x, y) = \frac{1}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{p_1^*} (y \cos \gamma + x \sin \gamma) - \varphi(x, y) \right] + 1 \right\}, \quad (4.1)$$

式中： $\varphi(x, y)$  为成像面某一点的相位移动。

吸收光栅的强度传输函数  $I_2(x, y)$  可以表达为

$$I_2(x, y) = \frac{1}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{p_2} (y \cos \gamma - x \sin \gamma) \right] + 1 \right\}. \quad (4.2)$$

Moiré 条纹强度图案是二者强度函数的叠加，先假设干涉条纹没有畸变时，即

$\varphi(x, y)=0$ , 则

$$\begin{aligned} I(x, y) = I_1(x, y) \times I_2(x, y) &= \frac{1}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{p_1^*} (y \cos \gamma + x \cos \gamma) \right] + 1 \right\} \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{p_2} (y \cos \gamma - x \cos \gamma) \right] + 1 \right\}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

令  $A = \frac{2\pi}{p_1^*} (y \cos \gamma + x \cos \gamma)$  和  $B = \frac{2\pi}{p_2} (y \cos \gamma - x \cos \gamma)$ , 则式4.3可以写成:

$$\begin{aligned} I(x, y) &= \frac{\cos A + 1}{2} \times \frac{\cos B + 1}{2} = \\ &\quad \frac{1}{4} (\cos A + \cos B + 1 + \cos A \cos B) = \\ &\quad \frac{\cos A + 1}{2} + \frac{\cos B + 1}{2} + \frac{1}{8} \cos(A+B) - \frac{1}{4} + \frac{1}{8} \cos(A-B). \end{aligned} \quad (4.4)$$

其中, 前三项为高频项, 不能被 X 射线探测器检测到, 第四项为直流偏置项, 对信号解析无意义, 最后一项为 Moiré 项, 可以被探测器检测。被探测器测量到的 Moiré 条纹项  $I_m(x, y)$  可表达为

$$I_m(x, y) = \cos \left[ \frac{2\pi}{p_1^*} (y \cos \gamma + x \sin \gamma) - \frac{2\pi}{p_2} (y \cos \gamma - x \sin \gamma) \right]. \quad (4.5)$$

采集到 Moiré 条纹后数据处理流程图如图4.3所示。

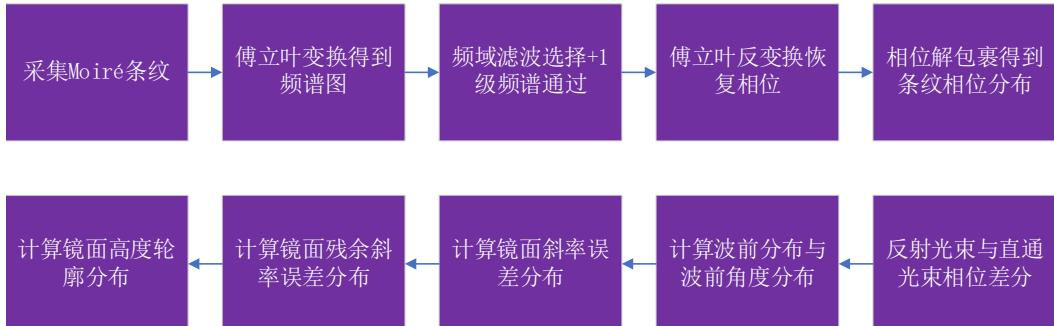


图 4.3 Moiré 条纹后数据处理方法流程图

Moiré 条纹各行之间的相位是独立的, 利用傅立叶方法可以逐行求解相位, 此时, 由于相位移动  $\varphi(x, y)$  产生畸变的 Moiré 条纹的每一行条纹强度分布可表达为

$$I_m(x, y) = a(x, y) + b(x, y) \cos \left[ \frac{2\pi}{p_2} \left( \frac{p_2}{p_1^*} \sin \gamma - \sin \gamma \right) x + \frac{2\pi}{p_2} \left( \frac{p_2}{p_1^*} \cos \gamma - \cos \gamma \right) y + \varphi(x, y) \right]. \quad (4.6)$$

令  $f_0 = \frac{1}{p_2} \left( \frac{p_2}{p_1^*} \sin \gamma - \sin \gamma \right)$ ,  $\psi = \frac{2\pi}{p_2} \left( \frac{p_2}{p_1^*} \cos \gamma - \cos \gamma \right) y + \varphi(x, y)$ , 则式4.6可改写为

$$I_m(x, y) = a(x, y) + b(x, y) \cos(2\pi f_0 x + \psi). \quad (4.7)$$

$f_0$  是 Moiré 条纹在 Y 方向上的空间频率，也叫做载波频率，直接将探测器采集到的强度分布图  $I_m$  傅立叶变换可得到

$$F [I_m(x, y)] = A(f, y) + C(f - f_0, y) + \bar{C}(f + f_0, y), \quad (4.8)$$

式中： $f$  为 X 方向上的空间频率； $F(\cdot)$  为傅立叶变换函数。将三个频率项在傅立叶空间分离， $A(f, y)$  是中心频率， $c(f - f_0, y)$  和  $\bar{c}(f + f_0, y)$ ，分别为 +1 级频谱和 -1 级频谱。由于相位  $\varphi(x, y)$  是连续函数，故其在 Y 方向的变化相当缓慢<sup>[12]</sup>。其相位可通过设置频域滤波器，只让 +1 级频谱通过，去除其他所有级次的频谱，再对滤波后的频谱进行傅立叶反变换计算得到，即

$$\psi(x, y) \bmod (2\pi) = \arg \{ F^{-1} [C(f, y)] \}, \quad (4.9)$$

式中： $\bmod(g)$  为取余函数； $F^{-1}(\cdot)$  为傅立叶逆变换函数； $\arg(\cdot)$  为复数的幅角。求解出的相位图分布在  $[-\pi, \pi]$  之间，相位解包裹后可以得出真实相位分布。

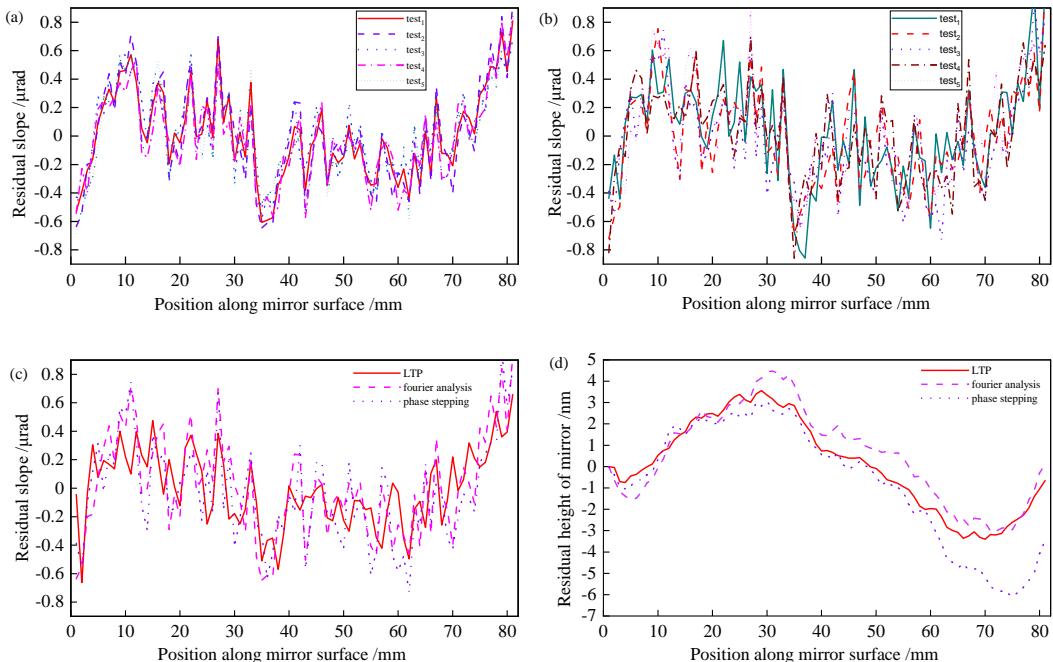


图 4.4 实验结果。(a) 傅立叶分析技术 5 次测量的重复性；(b) 相位步进 5 次测量的重复性；(c) 三种测量方式下的残差斜率；(d) 三种测量方式下镜面的残差高度

如图4.4 (a) 所示，在 Moiré 模式下使用傅立叶分析技术可得到五次测量下的重复性较稳定，具有很好的一致性和重复性，图 (c)、(d) 分别是 Moiré 模式下测量的反射镜斜率误差分布与高度轮廓，并将其与机械式相位步进法进行对比，详细比较将在4.2.2节描述。

## 4.2 机械式相位步进

### 4.2.1 相位步进测量

相位步进方法，是一种通过逐点强度测量来确定调制信号相位位置的测量方法。当在一个点测量强度时，信号的相位至少移动两次已知量（空间或时间）。可以根据三个或更多个测量值来计算相位位置。如果存在三个以上的测量值，则可以通过合理性检查和或通过平均来改善信号实现误差校正。在光栅干涉仪中，光强随着光栅位置扫描变化的曲线称为位移曲线<sup>[87]</sup>，位移曲线近似为三角函数。

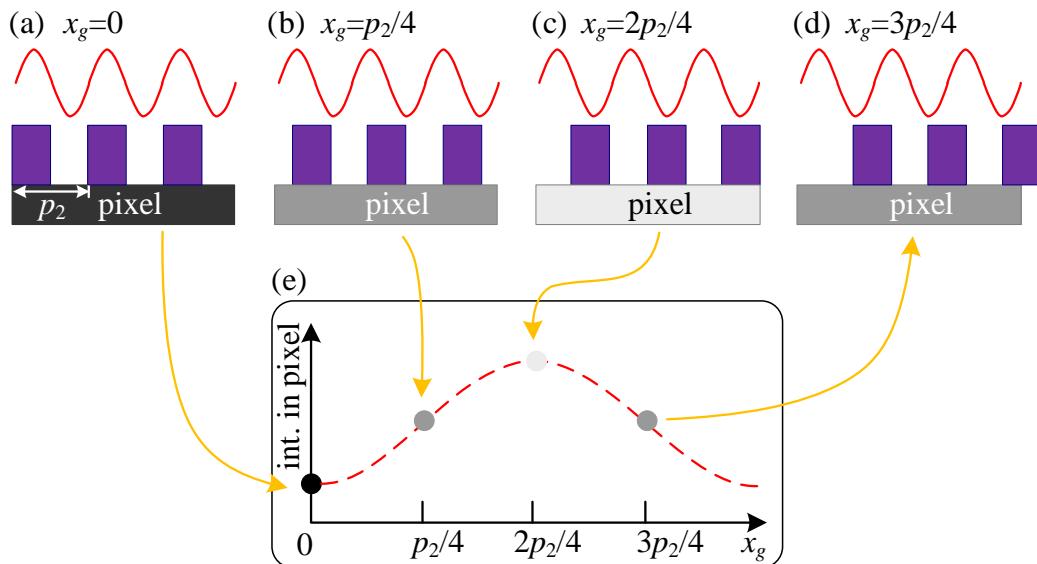


图 4.5 相位步进过程以及位移曲线产生过程。

一个相位步进周期中，相位光栅  $G_1$  的 Talbot 自成像和吸收光栅  $G_2$  的四步相位步进采集以及位移曲线产生的过程如图4.5所示<sup>[69]</sup>。机械式相位步进是在相位光栅  $G_1$  与分析光栅  $G_2$  调整至莫尔条纹在探测器上消失，也即二者近似平行时， $G_2$  在光栅周期方向上等间距步进平移扫描，每次步进的步长为  $p_1^*/K$ ， $K$  是单个周期内总的步数， $K \geq 3$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ ,  $k$  是步序数。镜面反射光束强度可用余弦函数可以表示为<sup>[69,88]</sup>

$$I_k^s(x, y) = A^s(x, y) + B^s(x, y) \cos \left\{ \phi^s(x, y) + \frac{2\pi k}{K} \right\}, \quad (4.10)$$

其中， $A$ ， $B$  为相位步进曲线的光强与可见度的平均值。微焦点 X 射线光栅干涉仪中直通光强度可以表示为

$$I_k^r(x, y) = A^r(x, y) + B^r(x, y) \cos \left\{ \phi^r(x, y) + \frac{2\pi k}{K} \right\}. \quad (4.11)$$

从而求解出反射镜面型误差引起的相位步进相移量（或者说吸收光栅平面对应的相位移动量） $\varphi(x, y) = \varphi^s(x, y) - \varphi^r(x, y)$ 。在本装置中，我们采用微焦点光源，可以在一幅图像中同时获得直通光与反射光图案，如图4.6所示，本文将直通光光强作为参考光信号，然后利用式2.39与式2.40即可求解出波前角度分布。

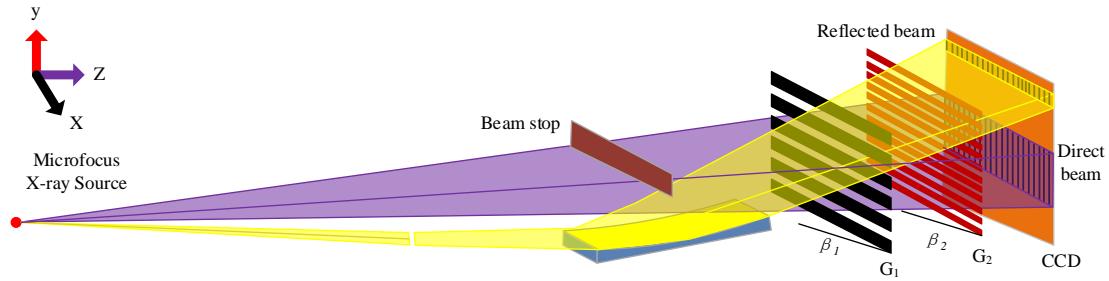


图 4.6 微焦点 X 射线光栅干涉仪光束原理图

相位步进方法的图像采集过程为：本实验每次相位步进 30 个周期，每个周期使用压电平移台等间距步进 10 步，共 900 步，压电行程在  $100 \mu\text{m}$  以上，满足实验要求，探测器采集到反射光与直通光束区域内均匀地亮度信号图像，分别恢复每个步进周期每行像素的相位值，如图 4.7 为反射光不同行的相位步进曲线，由于显示大小关系，这里选取其中四行，每行步进两周期的数据，从图中可以看出，不同行之间周期大小基本一致，但是相位有所移动，相位变化量时随机的，这是因为反射镜斜率误差也是随机的。逐行求解反射光与直通光相位后，将反射光条纹与直通光条纹的相位变化逐行作差，即可求出波前畸变引起的相位变化。然后求 30 次相位的标准差即为最小干涉条纹相位移动量<sup>[84]</sup>。再根据式 3.1 即可算出反射镜测量的角度灵敏度，本装置中面形测量角度灵敏度为 90 nrad。

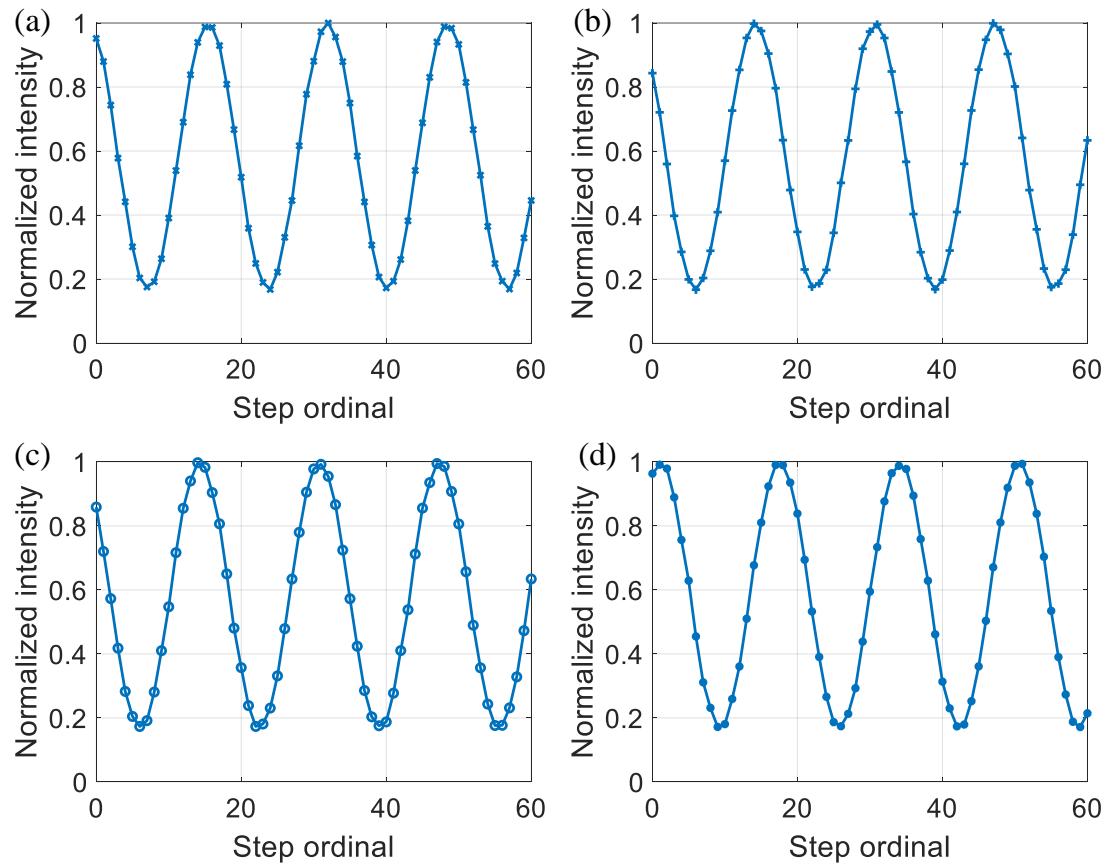


图 4.7 逐行重建的相位步进曲线。(a)(b)(c)(d) 为反射光束不同行的相位步进曲线。

### 4.2.2 两种模式对比

如图4.4 (b) 所示，在机械式相位步进模式下得到五次测量下的重复性也较稳定，具有很好的一致性，但是由于扫描时间较长，机械部件可能有漂移，导致长时间多次测量时不如 Moiré 模式稳定。相位步进和 Moiré 模式都能以 1/100 周期或更好的速度确定干涉图案的位置。与傅立叶分析的 Moiré 条纹分析相比，前者简单、精确且空间分辨率高<sup>[89-91]</sup>，斜率误差的精度受到 Moiré 相位  $\varphi$  恢复精度的限制<sup>[39]</sup>。

出现该现象的原因是当压电位移台带动吸收光栅在 Y 轴方向上移动一个周期时，不同周期之间位移量有误差。相位步进方法有机械振动、电压漂移、温度变化，以及压电陶瓷存在迟滞和蠕变等特性。然而，傅立叶分析无需机械位移，只需要在光栅对准后保持在某个位置锁死即可。在理论上，相位步进模式可以带来高角度灵敏度和高空间分辨率，但在光通量较低的微焦点光源下，相较于傅立叶分析方法，相位步进方法在测量精度方面没有优势，如图4.4(c) 所示，并且还会因为机械运动造成重复性误差偏大。傅立叶分析方法与 LTP 测量结果差值的均方根小于 200 nrad。图4.4(d) 显示了 LTP、傅立叶分析和相位步进技术拟合的高度轮廓线，可以发现傅立叶分析技术与 LTP 的一致性更好。

### 4.2.3 测量空间分辨率

测试镜的空间分辨率  $\Omega$  受到垂直剪切长度  $\Delta$  和系统有效像素大小的限制<sup>[82,92]</sup>。

系统有效像素大小的限制与干涉仪空间分辨率有关，X 射线光栅干涉仪在透射物成像时的空间分辨率  $\zeta$  由两方面决定：一是微焦点 X 射线源的源尺寸  $\omega$ ，二是 X 射线 CCD 的分辨率  $D_0$ ，干涉仪空间分辨率可以通过以下方式计算<sup>[93]</sup>

$$\zeta = \frac{\sqrt{(D_0)^2 + (M_s - 1)^2 \omega^2}}{M_s}, \quad (4.12)$$

其中  $M_s$  是透射物体的空间放大率， $M_s = S/l_s$ 。 $S$  是装置的长度（光源到探测器距离）， $l_s$  是从光源到可变形镜中心的距离。被测物体是一个 100 毫米长的平面单层镜，略入射角为  $\epsilon \approx 5$  mrad。因此，受有效垂直像素尺寸限制的测试镜的空间分辨率，可以用透射物体空间分辨率除以略入射角度得到沿镜子方向分辨率  $\Omega_1$  为  $\Omega_1 = \zeta/\epsilon$ 。

剪切长度  $\Delta$  限制可以表示为<sup>[39]</sup>：

$$\Delta = 2\lambda Z_N/p_1. \quad (4.13)$$

对于测试镜，受垂直剪切限制的空间分辨率为  $\Omega_2 = \Delta/\epsilon$ 。 $\Omega_1 < \Omega_2$ 。因此，本例中的剪切  $\Delta$  是主要限制。沿镜面方向的斜率误差空间分辨率  $\Omega$  约为 0.9 mm。

### 4.3 电磁相位步进

前文中我们提到，相位步进模式既可以步进光栅也可以步进X射线光源，但是光源体积大、笨重，考虑到机械漂移等，光源要做到高精度的机械式步进非常困难。在这里，我们提出了一种相位步进的改进版本，使用电磁相位步进进行波前传感和光学计量，通过电磁相位步进获得的测量的斜率误差沿镜面的分布更加准确、快速，并且不依赖于机械稳定性。

我们使用通电螺线管（铜线圈）产生磁场来驱动X射线源的焦点移动，相位光栅 $G_1$ 下游的干涉条纹，也发生移动，通过标定移动距离后，可以通过控制通电螺线管的电流大小，来控制焦点移动距离。图4.8(b)为标定后的通电线圈电流大小与焦点移动距离的关系，二者总体上成线性关系。

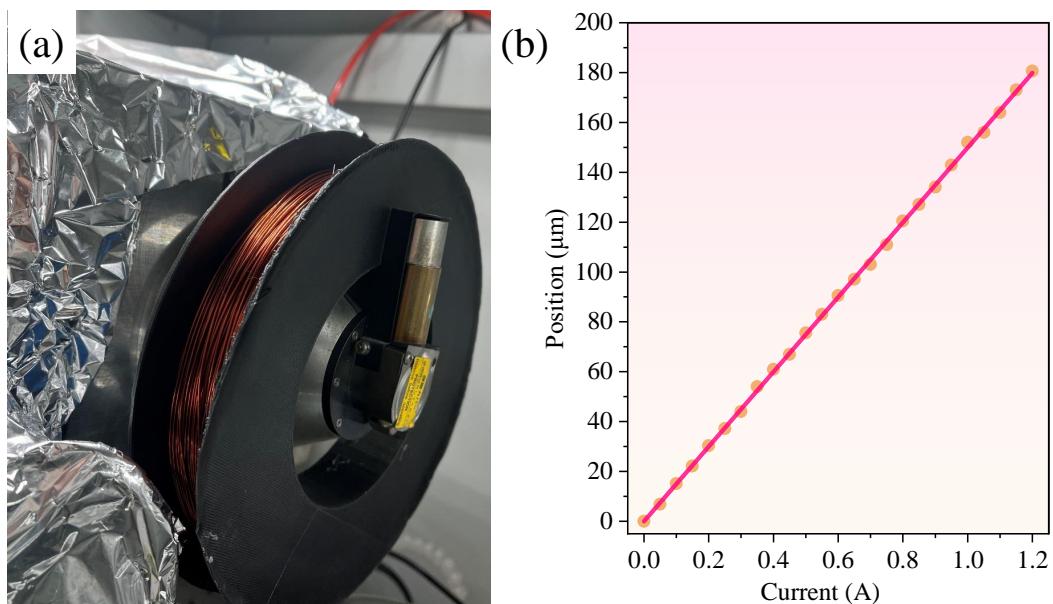


图4.8 自制电磁线圈与标定。(a)自制电磁线圈放置在微焦点X射线源外壳的锥束窗口外侧，(b)测得的X射线焦斑移动与铜线圈电流的关系。

微焦点X射线源的焦点被螺线管线圈的磁场驱动，引起测试镜的反射光束和直射光束的移动。当调整两光栅近似垂直于Y方向但有较小角度时，可以看到在直通光与反射光区域有明显的Moire条纹。如图4.9当给铜线圈施加电流时，可以看到明显的条纹移动。波前斜率误差可以通过 moiré 条纹的水平位置(X方向)和周期来重建，其与沿镜面纵向的斜率误差成正比。

沿镜面的纵向位置与X射线探测器平面上的垂直位置对应。该图像的每行(行数:  $j$ )像素的相位  $\varphi$  是独立的，Moiré 条纹分量沿水平 X 方向的反射光束  $I_j^r(x)$  和直通光束  $I_j^d(x)$  的强度分布函数可写为

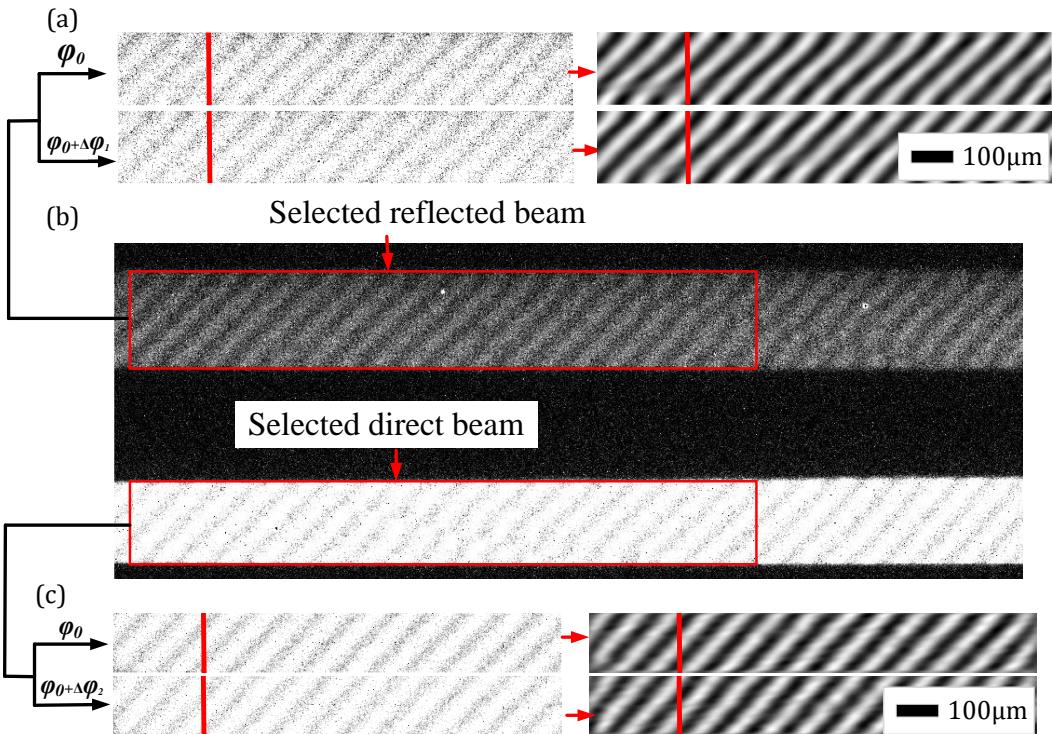


图 4.9 探测器采集的条纹图 (a) 反射光条纹图与处理后的图像, (b) 探测器采集原图像包含直通光与反射光, (c) 直通光条纹图与处理后的图像。

$$\begin{aligned} I_j^r(x) &= a_0^r + b_0^r \cos \left\{ \frac{2\pi}{p_{xj}} + \varphi_j^r + \frac{2k\pi}{K} \right\}, \\ I_j^d(x) &= a_0^d + b_0^d \cos \left\{ \frac{2\pi}{p_{xj}} + \varphi_j^d + \frac{2k\pi}{K} \right\}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

其中  $K$  是相移数,  $k$  是相位步进计数器,  $p_{xj}$  是 Moiré 条纹的周期。通过五步相移算法重建相位, 每个相步进周期包括五个不同大小的输入电流进入铜线圈, 产生五个不同的锥形束焦点位置, 焦点移动步长为  $8.5 \mu\text{m}$ 。在每个位置采集一幅图像, 实验结果如图4.9所示。本实验中的相位光栅是不连续的 (制造商: Microworks GmbH), 这会导致不连续的条纹和相位误差。他们使用聚合物作为相移材料 (需要保持  $8 \text{ keV}$  的吸收), 大高宽比光栅制造时, 中间需要有支撑结构, 因此会看到不连续的光栅线, 线与线之间称为桥梁。因此我们选择图像质量良好的区域 (红色矩形) 进行重建。图4.9 (a) 和图4.9 (c) 左侧是反射光与直通光红色区域条纹的提取, 右侧是图像滤波处理后的条纹。标记为  $\varphi_0$  和  $\varphi_0 + \Delta\varphi$  的图像是在有或没有磁场, 以证明光束的移动。红线代表 X 射线探测器上的相同位置。

因此, 每行  $j$  处的反射光束  $\varphi_j^r$  和直通光束  $\varphi_j^d$  的相位可以通过相应行相移光强值重建, 入射波前  $\varphi_j$  的相位畸变可以使用  $\varphi_j = \varphi_j^r - \varphi_j^d$  计算。

直射光束还可用于实时校准焦点的移动。求解出每一行条纹相位移动之后再经过相位解包裹即可像上述两种方法一样求出波前角度分布与镜面斜率误差。

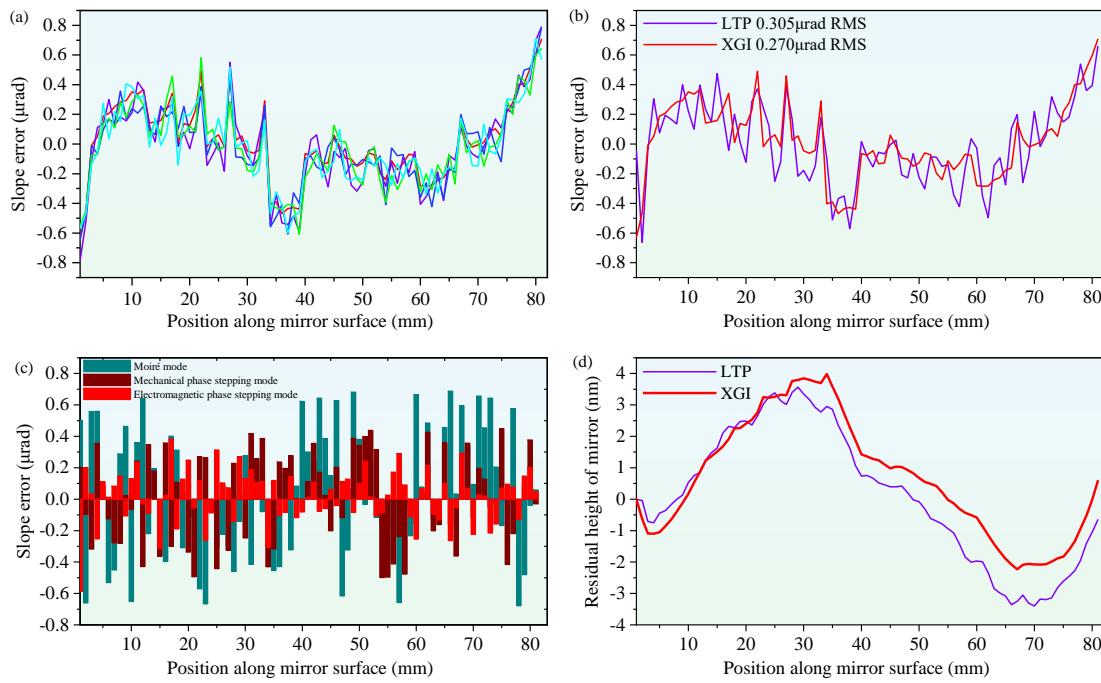


图 4.10 电磁相位步进 X 射线光栅干涉仪测量的镜面斜率误差。(a)X 使用电磁相位步进五次测量的可重复性, (b) 电磁相位步进与 LTP 测量的斜率误差之间的比较, (c)Moiré 条纹、机械相位步进和电磁相位步进模式的对比数据, (d) 电磁相位步进与 LTP 测量的残余高度误差对比。

我们选择镜子中间 80 mm 的工作区域进行测量, 使用电磁相位步进获得沿测试镜面的斜率误差  $\theta$  的 RMS 为 0.270  $\mu\text{rad}$ , 图 4.10 (a) 显示了经过平面镜反射的波前角度的五次测量结果, 计算的得到电磁相位步进的重复性  $R_{fm}$  为 19.8 nrad。此外, 我们还使用 LTP 检查斜率误差, 以确认电磁相位步进方法的准确性, 结果具有非常好的一致性, 红线和紫线之间的差异小于 0.2  $\mu\text{rad}$ , 如图 4.10 (b) 所示。为了证明所提出的方法优于之前的工作<sup>[34]</sup>和机械相位步进模式, 图4.10 (c) 对比了 Moiré 条纹计量模式、机械相位步进和电磁相位步进模式数据测量结果, 纵坐标为三种测量模式的测量值与 LTP 测量值之差。可以看出电磁相位步进的角度测量结果与 LTP 偏移最小, 其稳定性与精度也更高。图4.10 (d) 显示了测试镜的减去二次曲面后的高度轮廓。

相邻像素行之间的条纹相位的平均波动小于 Moiré 条纹周期的 1/100, 为光栅干涉仪提供了高于 100 nrad 的灵敏度。但该装置的光通量远低于同步辐射或其它传统 X 射线管, 导致探测器记录的图案质量较低, 并限制了更高 Talbot 阶数的使用。采用液态金属靶 X 射线源等亮度较高的微焦点 X 射线源, 可以提高光栅干涉仪数据的灵敏度和准确度。

本方法测量误差来自于多个方面, 热稳定性和机械稳定性(镜面夹紧)等多个参数可能会影响测量数据, 焦点的移动也可能受到环境磁场的影响, 导致相移技术中出现相位误差。此外, 就镜面位置而言, 空间分辨率约为 0.9mm, 与4.2.3节

计算结果相同。由于 X 射线衰减因子与能量相关，因此光子能谱及其有效能量会因光束路径中的吸收而变化，这可能会导致测量误差，从而影响波前的相位重建精度与反射镜镜的斜率误差测量。

#### 4.4 小结

本章首先在 Moiré 条纹模式测量了平面镜面形误差，并介绍了相位提取方法，得到了镜面斜率误差分布和高度分布；随后使用压电平移台，在机械式相位步进模式下提取条纹相位变化。机械式相位步进模式下得到的重复性也较稳定，具有很好的一致性，但是由于扫描时间较长，机械部件可能有漂移，导致长时间多次测量时不如 Moiré 模式稳定，但其相位恢复空间分辨率高。

采用电磁线圈驱动微焦点光源靶的移动，在电磁式相位步进模式下进行相位恢复，提高了系统的测量精度和稳定性。

实验室级的光栅干涉仪面形测量技术开发，为同步辐射光源以及自由电子激光提供了关键技术支撑。同时作为独立的实验仪器，也可做为 X 射线反射镜、折射透镜以及衍射透镜的计量工具；为镜体加工制造过程提供反馈信息；为 X 射线自适应光学反馈信号的关键技术提供实时波前测量和相干光束质量评价，以及波前反馈策略与控制算法开发，波前调控机器学习训练集数据收集等。

后续拓展至二维光栅干涉仪，可同时得到镜体子午和弧矢方向的斜率误差信息。

光学器件的检测与制造对于高性能光源发展，X 射线科学进步同样重要。本文最后一章介绍在瑞士保罗谢尔研究所 (PSI, Paul Scherrer Institut) 的工作，主要集中于 X 射线光学器件的设计、模拟与制造技术，并将开发的关键光学器件应用于消色差 X 射线显微镜。

## 第5章 消色差X射线显微镜聚光器研制

本章介绍消色差X射线显微镜关键技术的研制。首先介绍X射线显微镜发展、原理和应用；然后介绍新型消色差X射线显微镜的设计与消色差透镜原理；再详细介绍关键器件X射线旋转椭球聚焦镜设计、制造等工艺，以及在制造完成后对椭球镜的测试；最后利用搭建的消色差X射线显微镜系统进行成像实验。

### 5.1 X射线显微镜简介

X射线显微镜可实现物质内部三维结构的无损纳米级动态观察，在生命科学、医学、矿物岩石、纳米材料和半导体检测等领域有着广泛的应用<sup>[94-97]</sup>。从20世纪70年代开始，随着同步加速器光源和纳米制造技术的出现，X射线显微镜也开始蓬勃发展。

#### 5.1.1 透射X射线显微镜原理

X射线显微镜的类型主要有三类：

1. 透射X射线显微镜 (TXM, Transmission X-ray Microscope) 使用高通量X射线光源快速采集2D图像，并通过采集投影图像进行断层扫描得到3D图像，光谱显微镜也是如此<sup>[98]</sup>。

2. 扫描透射X射线显微镜 (STXM, Scanning Transmission X-ray Microscopy) 采集低剂量图像和具有高能量分辨率的点光谱，用于元素和化学状态分析，并且需要高亮度光源。

3. 扫描荧光X射线微探针 (SFXM, Scanning fluorescence X-ray Microscopy) 与STXM类似，不同之处在于X射线荧光由能量分辨探测器收集以进行痕量元素能谱分析。

所有三种方法现在都可以工作在100 nm分辨率以下，在一些应用中能达到10-12 nm分辨率<sup>[99-100]</sup>。2014年来自美国Lawrence Berkeley National Laboratory的科学家使用Ptychography技术，实现了5 nm分辨率<sup>[101]</sup>。

因此X射线显微镜可以被分为两类：全视场成像和扫描成像。TXM、STXM和SFXM之间的一个关键区别涉及可接受的照明光源。在STXM和SFXM中，波带片物镜产生的光斑尺寸是光源的几何图像和光学器件的点扩散函数的卷积。如图5.1(b)所示，扫描显微镜需要单色光照明。

TXM的情况则不同：对于非相干明场成像，物体中的每个像素都可以独立

于其相邻像素进行成像（在良好的近似范内），因此可以使用非相干光同时照亮所有物体像素。TXM通常可与具有高通量（每个立体角的光子）的弯曲磁体同步辐射源或实验室源一起运行，而STXM和SFXM通常与提供高亮度的光源的波荡器一起操作（每个源区域的立体角）。

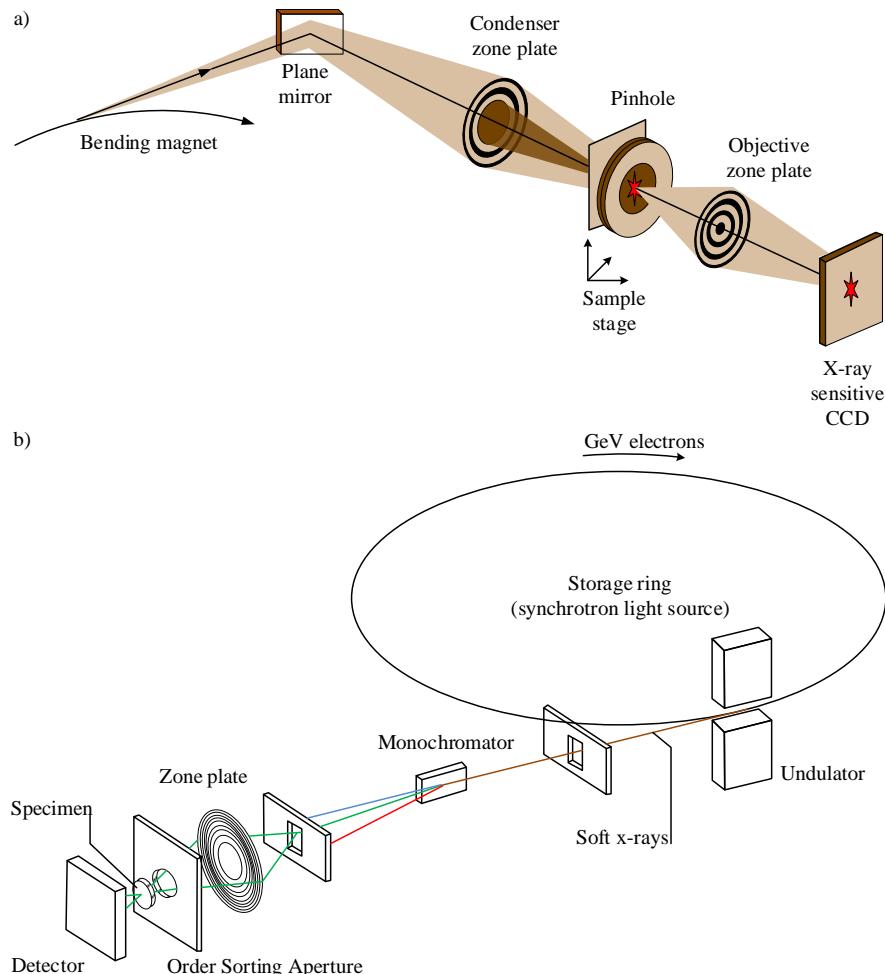


图5.1 两种X射线显微镜示意图<sup>[95]</sup>。(a) TXM, (b) STXM。

透射式X射线显微镜不依赖于同步辐射的高度相干光源，可以在实验室级得到应用。如图5.1 (a)，全视场透射X射线显微镜(TXM)原理如下：X射线经旋转椭球聚焦镜或者菲涅尔波带片(Fresnel Zone Plate, FZP)聚焦，使用光束阻挡器(Beam stop)去掉直通光，光束阻挡器可放置在聚焦镜前、后、或者内部中心；利用小孔(Pinhole)去除由于面形误差或者粗糙度引起的杂散光，形成均匀地聚焦光束照射到样品，聚焦光束为空心锥形，X射线穿过样品后，在波带片前成像面上形成环形光束，波带片接收到将携带样品信息的环形光束聚焦到X射线探测器上。X射线旋转椭球聚焦镜具有高效率，无色差、所占空间小等优点，是TXM系统聚光器的首选，它与物镜波带片是TXM中最重要的两个光学器件。

基于同步加速器的软X射线显微镜和实验室软X射线显微镜之间的主要区别是实验室X射线源的亮度较低，这使得难以在可接受的曝光时间下获得高空

间分辨率的实验室成像。因此，在设计实验室显微镜时，高亮度光源是必不可少的，但其本身仍然不够。

### 5.1.2 透射式X射线显微镜应用与研发难点

全场透射式X射线显微镜可实现物体内部结构纳米级原位、动态三维成像，被广泛应用于半导体、岩石矿物、生物细胞、药品、电池等领域的分析、研发与生产过程。如图5.2显示了透射式X射线显微镜在生命科学与能源领域的应用。

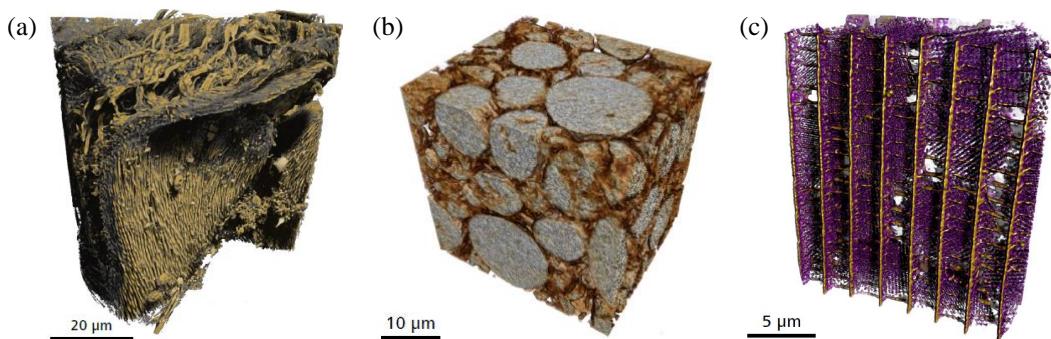


图5.2 透射式X射线显微镜成像图片（图片来源<sup>[102]</sup>）。(a) 双翅目苍蝇的吸盘肌肉组织和毛柱, (b) 锂离子电池中阴极孔网络和空隙, (c) 蝴蝶翅膀的纳米结构。

以新能源电池为例<sup>[103]</sup>，商用锂离子动力电池的制造不同尺度的缺陷都会导致急性衰竭或慢性退化从而影响电池寿命，nm级的裂纹也会影响电池寿命，跨尺度分析对于新能源动力电池或者储能电池来说极为重要。但目前工业用显微镜分辨率都在微米级，传统基于投影式的X射线显微镜分辨率低，受限于光源尺寸大小，如果利用同步辐射光源，成本高，机时申请困难，只能做部分科学实验。

因此，将透射式X射线显微镜由同步辐射加速器带入普通实验室内显得尤为重要。但是，建立桌面级透射式X射线显微镜需要克服如下困难：普通X光机亮度低，需要高效率，超精密X射线聚光器将光打到样品上，X射线聚光器直径在100 - 300 μm之间，内表面反射聚焦，加工十分困难；X光机发出的光是复色光，由于菲涅尔波带片在聚焦X射线时，不同波长的光会聚焦于不同位置，因此使用菲涅尔波带片作为物镜时，会带来色差<sup>[104]</sup>。桌面级消色差X射线显微镜需要发展新型集成式消色差X射线透镜替代菲涅尔波带片，前者可将复色X光聚焦到同一焦点附近，对于普通X光机的复色能谱，消色差透镜成像色差小，光通量更高。

## 5.2 桌面级消色差X射线显微镜

本节重点研究了内表面镀金的旋转椭球聚焦镜加工工艺，使用最新的消色差X射线透镜替代原有的菲涅尔波带片物镜，搭建桌面级消色差X射线显微镜。

### 5.2.1 消色差X射线显微镜原理

消色差X射线显微镜原理图如5.3所示，X光机发出锥形发散光束，由X射线旋转椭球聚光器作为聚光器(Condenser)进行反射式聚焦<sup>[105]</sup>，中心光束由光束阻挡器(Central stop)阻挡，杂散光由小孔(Pin hole)阻挡，聚光器收集一定立体角内的光子后，形成空心光锥汇聚到另一焦点打到样品上，为样品提供照明。光经过样品后，携带样品信息的环形光束打到消色差X射线透镜上，由消色差X射线透镜作为物镜放大成像至X射线探测器上，其中照明角度(Illumination angle)需要与消色差透镜的NA匹配。

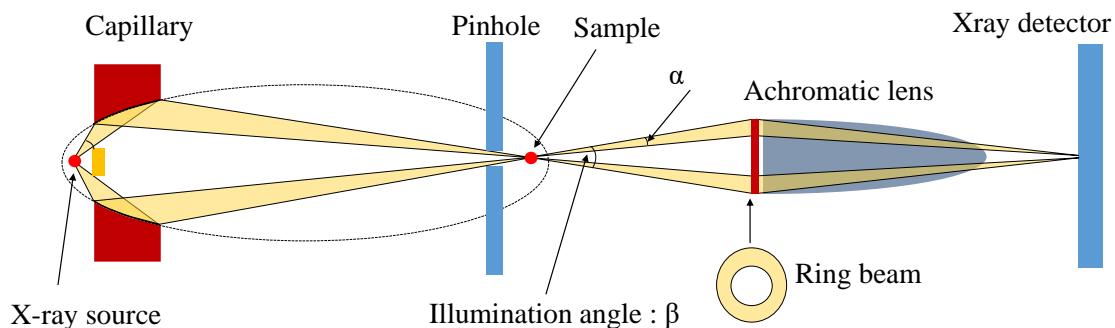


图 5.3 桌面式消色差 X 射线显微镜原理图

另一方面，透镜焦深  $l$  与样品厚度  $d$  要满足： $l > d$ ，因为物镜聚焦点不是理想的一个点，是具有一定焦深的半径为  $\delta$  的焦斑（艾里斑），如图5.4所示。艾里斑半径  $\delta=0.61\lambda/\theta$ ， $\lambda$  是波长， $\theta$  是聚光光束的半夹角。则焦深长度为

$$l = \frac{2\delta}{\tan(\theta)} \approx \frac{2\theta}{\sin(\theta)} \approx \frac{2\theta}{\theta} = 3.28 \frac{\delta}{\lambda}。 \quad (5.1)$$

当样品直径小于焦深，就可以在像面获得样品放大像。

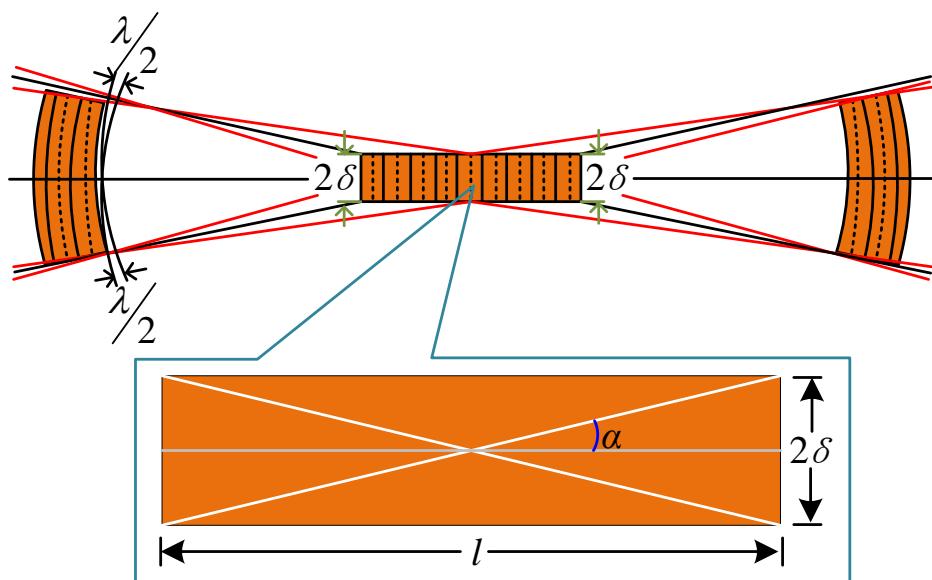


图 5.4 透镜焦深长度示意图

### 5.2.2 消色差X射线透镜简介

在可见光领域，早在18世纪就发明了消色差透镜，通过不同材料的两种透镜结合的方式，使二者色差相互抵消实现消色差。但在X射线光学领域，很难找到折射率相差较大的两种材料，无法采用与可见光相同的解决方案，因此只能从结构上创新。

菲涅尔波带片由一组同心圆环（称为菲涅耳区）组成，如图5.5(a)和(b)，这些环在不透明和透明之间交替。照射波带片的光将在不透明区域周围发生衍射<sup>[106]</sup>。其紧凑的尺寸提供了极大的灵活性，可以作为微纳米探针实验的聚焦透镜以及用作TXM的物镜<sup>[107-108]</sup>应用在硬X射线成像。

然而，菲涅尔波带片聚焦效率（定义为可用于成像光通量与输入通量的比例）低，聚焦效率与波带片的制造精度，材料的光学常数和结构高度有关<sup>[109-110]</sup>。菲涅耳波带片的聚焦效率与结构的高度呈二次方关系。在不考虑吸收，只考虑折射的情况下，在 $\pi$ 相移时达到最大值；考虑吸收时，最大衍射效率的相移位置有所偏移。此外，当使用波带片光学器件时，波带片光学器件的理论分辨率 $\Delta l$ 取决于其最小波带宽度 $\Delta r$ ， $\Delta l \approx 1.22\Delta r$ <sup>[95]</sup>。波带片聚焦的所有焦点中效率最高的是一级衍射，由于制造限制，高分辨率波带片在硬X射线范围内效率只有几个百分点<sup>[111]</sup>。光栅大多具有多个衍射级。在菲涅耳波带片中，这会导致多个焦点，负衍射级甚至会导致光束发散，如图5.9(a)所示，为金材料菲涅耳波带片聚焦的光场分布。当改变入射光能量时，焦点发生平移。因此在用复色光照明时，用菲涅尔波带片做物镜会有严重色散。其焦点满足如下公式：

$$r_n = \sqrt{n\lambda f + \frac{1}{4}n^2\lambda^2}。 \quad (5.2)$$

其中n是波带片的环数， $\lambda$ 是波带片要聚焦的光的波长，f是从波带片中心到焦点的距离。当波带片与焦距相比较小时，可以近似为

$$r_n \approx \sqrt{n\lambda f}。 \quad (5.3)$$

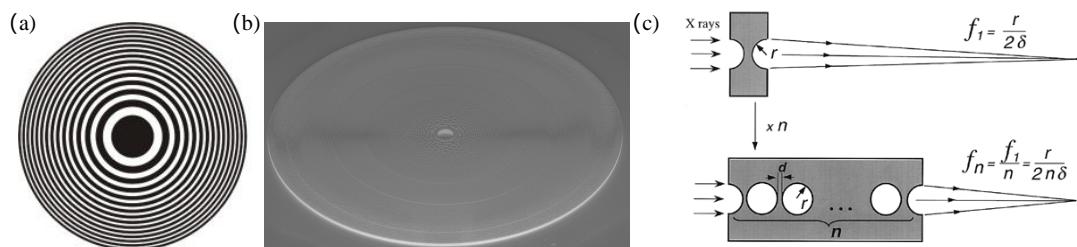


图5.5 菲涅尔波带片与折射透镜。(a) 菲涅尔波带片，(b) 菲涅尔波带片SEM图，(c) 折射透镜原理。

利用折射原理进行X射线聚焦的技术主要有复合折射透镜(CRLs)<sup>[112]</sup>和Kinoform透镜。CRLs是多个透镜折射的叠加，将多个折射透镜组合在一起后，使得单个透镜的折射效果被放大<sup>[113]</sup>。因为X射线折射率小于1，因此折射聚焦透镜的形状都为凹透镜形，即中间低两边高形状；如果是中间高两边低的凸形，则为扩束镜，有将光束发散的作用，如图5.5(c)。聚焦形透镜其形状一般为抛物线，当平行光入射时，会聚焦到一个焦点上，焦点位置距离透镜中心的距离f表达为<sup>[114]</sup>：

$$f = \frac{r}{2\delta}, \quad (5.4)$$

其中r为抛物线顶点的曲率半径，δ为X射线在透镜中传播的折射因子。

消色差X射线透镜由菲涅尔波带片与折射透镜组合而成，通过电子束光刻和金电镀制造的菲涅尔波带片衍射镜<sup>[115]</sup>，再用双光子聚合3D打印制造出折射透镜。折射透镜具有离焦扩束效果，其焦距与能量变化二次方相关， $f_{RL}(E) = f_R \left[ \frac{E}{\Delta E} \right]^2$ ，其中 $f_{RL}$ 是实际焦距， $f_R$ 是设计焦距，E是设计光子能量， $\Delta E$ 是能量偏移；菲涅尔波带片具有聚焦效果， $f_{FZP}(E) = f_D \left[ \frac{E}{\Delta E} \right]$ ，其中 $f_{FZP}$ 是实际焦距， $f_D$ 是设计焦距。通过计两者结合后的透镜焦距，可以得到新透镜焦距 $f_A(E)$ 满足如下关系<sup>[116-117]</sup>

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_A(E)} = & \frac{1}{f_D f_R} \left[ (f_D + f_R) - (f_R + 2f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right] + (f_R + 3f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^2 \right. \\ & - (f_R + 4f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^3 + (f_R + 5f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^4 - (f_R + 6f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^5 \\ & \left. + (f_R + 7f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^6 - (f_R + 8f_D) \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^7 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (5.5)$$

选择合适的参数，例如 $f_R = -2f_0$ ， $f_D = f_0$ 时，其中 $\frac{E}{\Delta E}$ 的一次项会被消除，则此时 $f_A(E)$ 可被写为

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_A(E)} = & \frac{1}{2f_0} \left[ 1 - \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^2 + 2 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^3 - 3 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^4 \right. \\ & \left. + 4 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^5 - 5 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^6 + 6 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^7 - \dots \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

将公式整理并利用泰勒级数展开可得：

$$\begin{aligned} f_A(E) = & 2f_0 \left[ 1 + \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^2 - 2 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^3 + 4 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^4 \right. \\ & \left. - 8 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^5 + 16 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^6 - 32 \left[ \frac{\Delta E}{E_0} \right]^7 + \dots \right], \end{aligned} \quad (5.7)$$

该公式即为消色差X射线透镜的焦距计算公式，当为平行光入射时， $f_A(E)$ 为聚焦点所在位置。基于此可以计算消色差透镜在某个中心能量附近的焦距变化曲线。

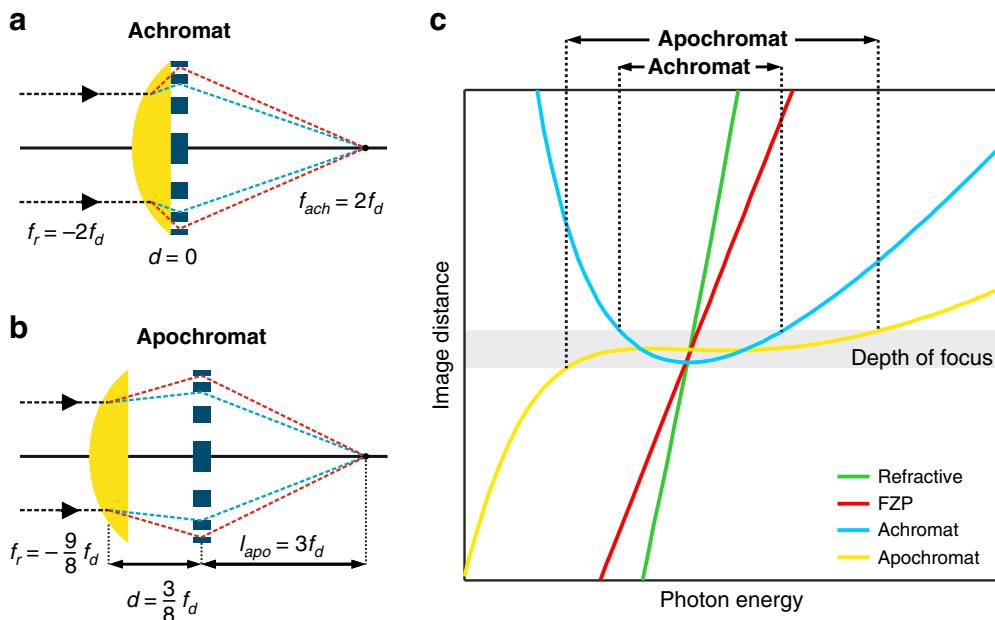


图 5.6 消色差透镜和复消色差透镜的几何设计，折射透镜和菲涅尔波带片进行不同组合<sup>[118]</sup>。(a) X射线消色差透镜和(b) X射线复消色差透镜，(c) 消色差透镜、复消色差透镜、菲涅尔波带片、折射透镜焦距曲线（色散）。

目前消色差透镜已发展出两代，2022年第一代消色差透镜问世<sup>[117,119]</sup>，由PSI的科学家开发，在光子能量5.8-7.2 keV区间可以实现消色差，焦点大小500 nm；2023年，Umut T. Sanli等人在原有基础上通过改进结构设计，增加空间光路得到复消色差透镜聚焦，如图5.6，实现了在8-11 keV的复消色差，焦点大小750 nm<sup>[118]</sup>。

### 5.2.3 集成式X射线消色差透镜模拟

前述两种消色差透镜均为单独器件，需要各自使用平移台校准、对准后才能使用，带来极大地不方便，团队设计了集成式X射线消色差透镜，集成式消色差透镜具有优良的稳定性、空间占用少、分辨率高的特点，适用于实验室级X射线显微镜。图5.7(a)所示为集成式消色差X射线透镜加工过程，通过创新的微纳加工工艺，直接在菲涅尔波带片的硅片上，使用双光子聚合3D打印制造出折射透镜组，整体高度达2.5 mm，设计焦距95 mm，镜头直径100 μm，如图5.7(b)所示。

本文分别仿真了菲涅尔波带片和集成式X射线消色差透镜在改变入射X射线能量范围从5.1 keV变化至9.6 keV，步长0.5 keV时，如图5.8可以看出，消色差透镜的焦点在中心焦点处的偏移明显小于菲涅尔波带片，焦点位置偏移在10 mm以内，其焦点位置偏移程度与光子能量变化率( $\Delta E/E_0$ )成二次函数关系，而

菲涅尔波带片焦点位置偏移程度与光子能量变化率( $\Delta E/E_0$ )成线性关系，该透镜在同步辐射光束线上测试聚焦光斑可低至200 nm。

当两种器件都处于设计中心能量(7.1 keV)平面波X射线照明时，沿Z轴光场强度分布图，设计焦距为96 mm。如图5.9，可以看出两种光学器件在设计能量下，焦点亮度与质量几乎一致。在光场的不同位置能看到高阶衍射级次的光存在，在设计能量处，消色差透镜在焦斑亮度与均匀性质量等并没有表现出优势。

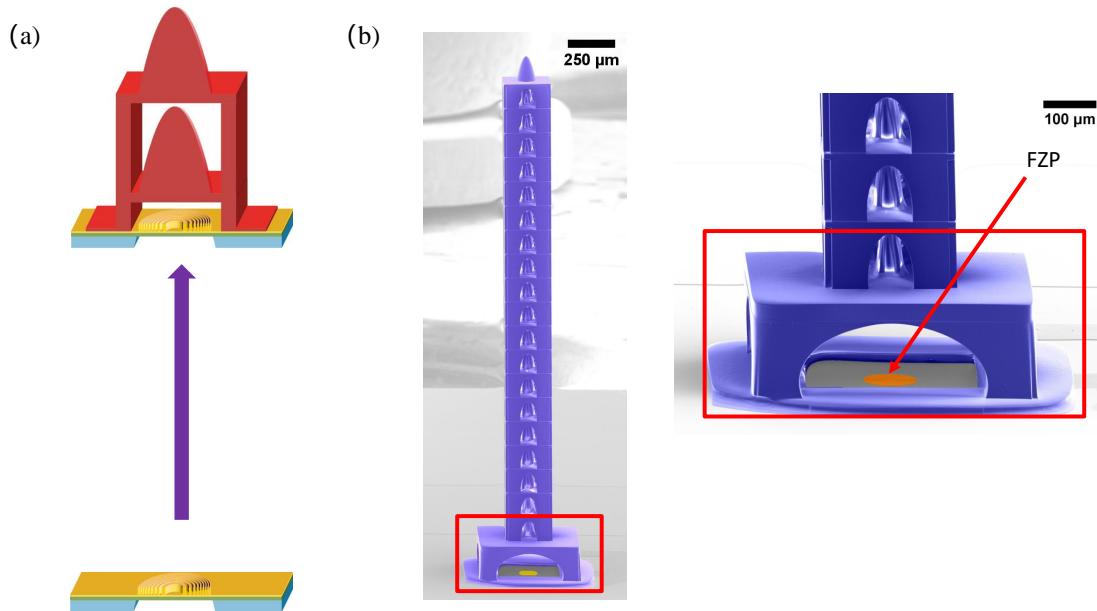


图 5.7 集成式消色差 X 射线透镜

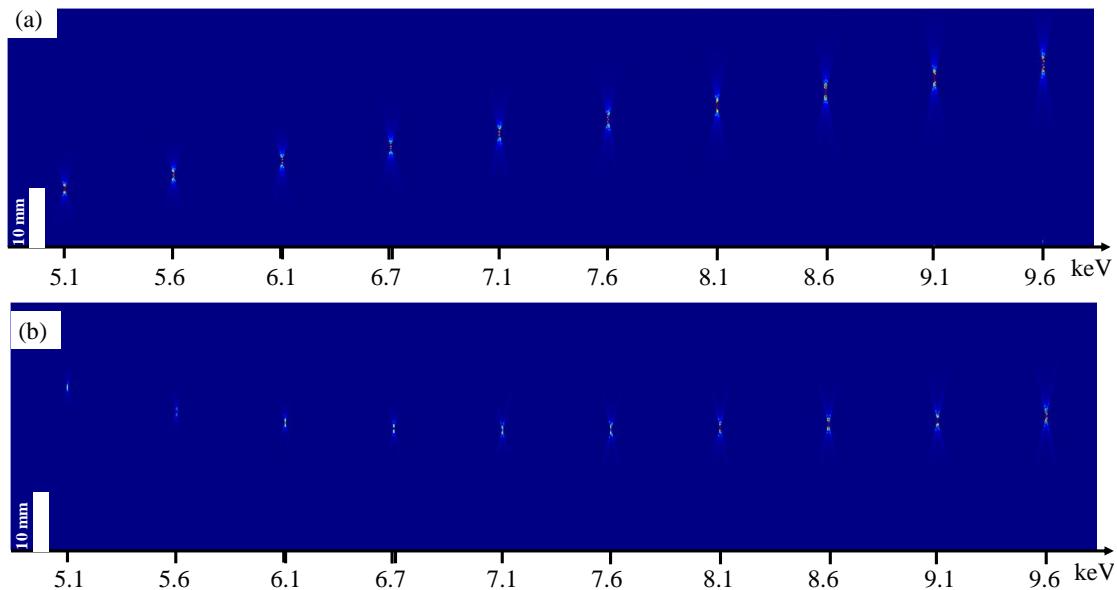


图 5.8 不同能量下两种物镜聚焦焦点位置仿真。(a) 金材料菲涅尔波带片，(b) 消色差透镜。

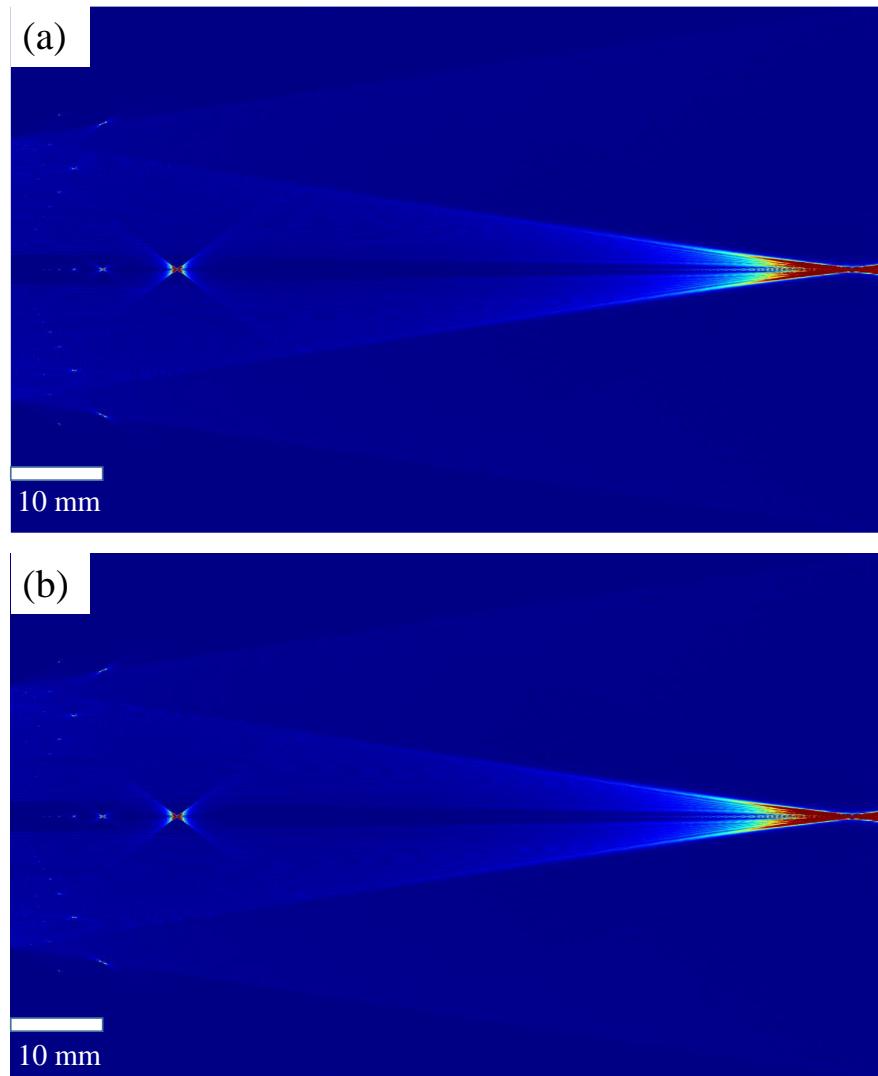


图 5.9 不同物镜下游波场沿光轴传播仿真图。(a) 金材料菲涅尔波带片, (b) 消色差透镜。

### 5.3 X射线旋转椭球聚焦镜聚光器设计

目前波带片<sup>[120]</sup>、多层膜镜<sup>[121]</sup>、Kirkpatrick-Baez 镜<sup>[122]</sup>和单毛细管 X 射线透镜<sup>[123-126]</sup>都可以用于 TXM 系统。但是波带片和多层膜镜具有有限的带宽, 不便于 TXM 在多个波长下成像。在实际应用中, 为了与作为物镜的波带片匹配 NA, 要求作为聚光器的波带片具有大直径、多波带数和小波带宽度, 这在制造上非常困难, 特别是对于硬 X 射线。并且, 这两种类型的聚光器都有低效率问题。Kirkpatrick-Baez 镜的照明不对称, 使得在 X 射线吸收成像中产生较差的图像质量, 并且不适用于相衬成像<sup>[127]</sup>。

作为透射式 X 射线显微镜的核心器件, X 射线旋转椭球聚焦镜具有无色差、照明对称、易于对准、大 NA, 大带宽和高效率等优点<sup>[128-129]</sup>, 且在聚焦 5-25 keV 能量范围的光子方面表现出良好的性能。在 X 射线显微术、同步辐射光源、电子探针 X 射线荧光、波长色散 X 射线荧光、X 射线衍射分析等领域具有极高应用价值<sup>[130-134]</sup>。

同步辐射用X射线旋转椭球聚光镜，具有极高的面形精度和超光滑表面<sup>[135-136]</sup>。例如，日本东京大学开发了面形误差PV值小于30 nm以及表面粗糙度为0.2 nm的软X射线聚光镜<sup>[137-139]</sup>。但是其内表面直径在2 mm及以上<sup>[140]</sup>，导致聚焦点的照明角在10 mrad以上，不满足实验室级X射线显微镜开发要求。因为菲涅尔波带片等成像透镜受制于微纳制造技术极限，最外环结构难以做到10 nm以下，使得菲涅尔波带片和消色差X射线透镜的NA都在1-2 mrad范围内。因此，需要开发小口径旋转椭球聚光镜以满足实验需求。

Xradia公司开发过细长型玻璃管透镜，采用玻璃丝拉制工艺，通过控制拉丝速度与温度得到设计面型<sup>[123]</sup>。但是玻璃内表面无法被镀膜，且X射线在玻璃表面反射率较低，X射线掠入射角的临界角较小，不能收集到很大立体角内的光子，无法提供更高强度的照明。

### 5.3.1 聚焦原理

X射线旋转椭球镜被认为是一种理想的反射聚光光学器件，理论上它可以高效、无色差地将软X射线聚焦到纳米点上<sup>[141]</sup>。椭球镜有一个管状的形状，从椭球镜体的一个焦点发出的X射线从内表面反射到另一个焦点。因为其旋转对称结构，因此具有高NA。目前，美国Sigray公司也有商品化的X射线非球面反射镜，其在同步加速器光学系统中可用于各种不同的光束线应用。国内仅有北京师范大学进行过X射线毛细管聚光镜产品相关研究，其它类型X射线光束变换聚光镜都被国外公司垄断。

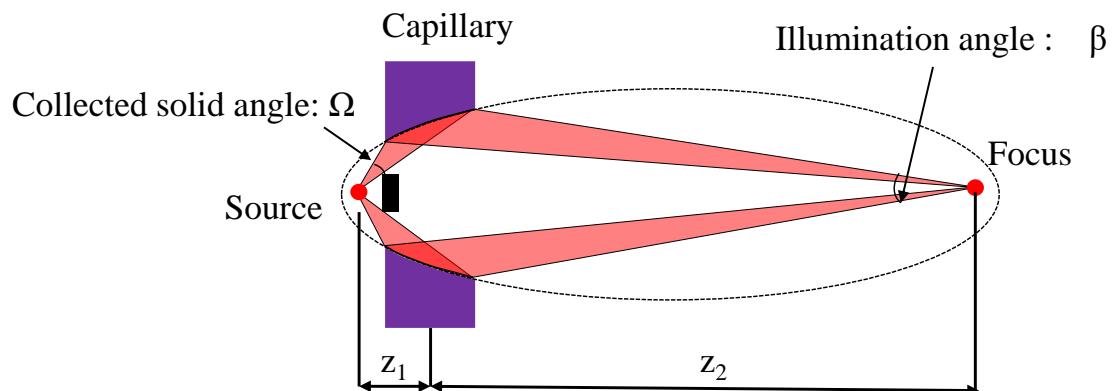


图 5.10 椭球镜聚光示意图

椭球面是椭圆绕着长轴旋转一周形成椭球体的表面，椭球镜的表面取整个椭球面的一部分，由点光源发出的锥形光束以掠入射角 $\theta_i$ 照在椭球镜上，点光源在椭球体的一个焦点上，聚焦点位于椭球体的另一个焦点<sup>[142]</sup>上，如图5.10所示，椭球镜收集到 $\Omega$ 立体角内的光子聚焦到另一个焦点处，通常光强可以提高1-3个数量级。聚焦点的质量取决于镜面粗糙度、材料反射率、镜面轮廓面形误差以及收集到光子的立体角。并且，该聚光是经子午和弧矢两个方向同时聚光，

因此聚焦光束均匀。

桌面式X射线显微镜受制于光强、体积、空气吸收等限制，一般长度在2-4m之间。椭球镜的照明角度需要匹配用于放大的物镜NA，通常角度为1mrad左右。此时，假设设计椭球镜焦距为400 mm，则椭球镜直径将在200 - 400 μm之间。当光源尺寸为 $\varepsilon_s$ ，光源点距离聚光镜中心距离为 $z_1$ ，聚焦点距离透镜中心距离为 $z_2$ 时，理论聚焦点的大小 $\varepsilon_f$ 可以表达为：

$$\varepsilon_f = \varepsilon_s \cdot \frac{z_2}{z_1} \quad (5.8)$$

### 5.3.2 几何设计

首先分析镜面反射率随入射角度变化的关系，镜面反射率数据来源于美国劳伦斯伯克利国家实验室X射线光学中心网站(CXRO)。假设镜面反射材料为镍(Ni, Nickel)，如图5.11(a)，当粗糙度为0时，得到当光子能量在6、8、10 keV时，入射角在6-10 mrad之间，反射率就会降到50%以下。能量越高，全反射角的临界值就越低，针对高能X射线其掠入射角更小，聚光条件更加苛刻，椭球镜制造难度更大，对于特别高能的X射线，例如20 keV以上的波段，TXM聚光镜只能利用衍射或者折射透镜进行聚光。

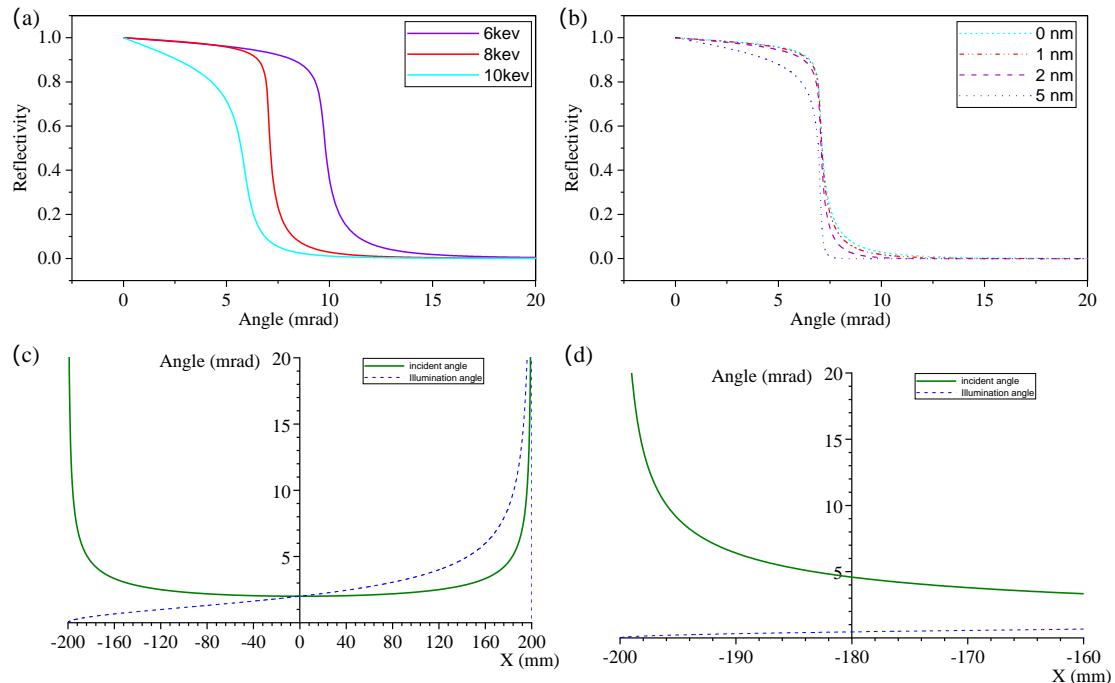


图5.11 Ni材料椭球镜几何设计计算。(a) 镜面反射率随入射角度变化关系，(b) 不同粗糙度条件下，镜面反射率随入射角度变化的关系图，(c) 入射角与照明角度角度计算，(d) 局部放大图。

图5.11(b)显示了在8 keV光子入射时，不同粗糙度条件下，镜面反射率随入射角度变化的关系图。可以看出粗糙度越大，反射率随着角度增大下降的越迅速，保证较好的表面光滑度是制造反射镜的关键。假设镜面反射材料为Ni，粗

糙度在3 nm左右，为了保证整体镜面具有较高的反射率，应保持入射角度始终小于7.5 mrad，这也是后面设计椭球镜几何形状的一个规则：保证入射角足够小获得较高的反射率。

表5.1 a=150 mm, b=0.325 mm时各项参数表

类型	数值
最小直径 (mm)	0.201
最大直径 (mm)	0.274
长度 (mm)	7
收集光子立体角 (mSr)	0.25
平均入射角 (mrad)	5.9

此时我们假设选择一个椭圆，半长轴a=200 mm，半短轴b=0.4 mm，光源放置在左侧焦点处。将椭圆放在标准方程坐标系中，椭圆方程为： $\frac{x^2}{200^2} + \frac{y^2}{0.4^2} = 1$ ，计算从最左端-200 mm到最右端200 mm中间每个点的入射角与照明角度，如图5.11(c)所示，5.11(d)是局部放大图。可以看出，为了保证照明角度匹配后续物镜放大成像，照明角度 $\beta$ 需要小于1 mrad。为了保证较高的镜面反射率，镜面入射角度需要小于7.5 mrad，因此只能选择-175 mm至-190 mm区域的椭球镜进行制造。当反射镜表面镀膜材料换成金(Au)时，相同入射角度、粗糙度下，金表面反射率更高。

基于以上思路，本文设计两对X射线椭球聚焦镜，分别为半长轴a=150 mm和a=200 mm，取不同的半短轴b值。每组透镜的最小直径限制为200 μm，因为低于此数值超出现有加工能力。最大直径受限于照明角度，当直径超出照明角度限制时，圆环形光束会照射到物镜之外，不能被有效收集。

如表5.2所示，当增加半长轴尺寸时，保证相同入射角的情况下，椭球镜整体直径可以做的更大，也会带来更大的光子收集立体角，相应的，聚焦的点光源的亮度也更高。

表5.2 a=200 mm, b=4 mm时各项参数表

类型	数值
最小直径 (mm)	0.208
最大直径 (mm)	0.2377
长度 (mm)	16
收集光子立体角 (mSr)	0.5
平均入射角 (mrad)	5.45

## 5.4 X射线旋转椭球聚焦镜制造

X射线旋转椭球聚焦镜直径小至200 μm，要求面形精度高在几百nm以下，粗糙度要求小于5 nm，其在内表面很难加工，将精密加工技术与复制成型技术结合起来是加工此类微光学元件最有效的方式。本工艺将利用电镀法制备具有

椭球面形的精密芯轴，通过镀膜、电铸、脱模技术，获得旋转椭球面聚焦镜。

### 5.4.1 工艺流程

其工艺流程如5.12所示，步骤如下：

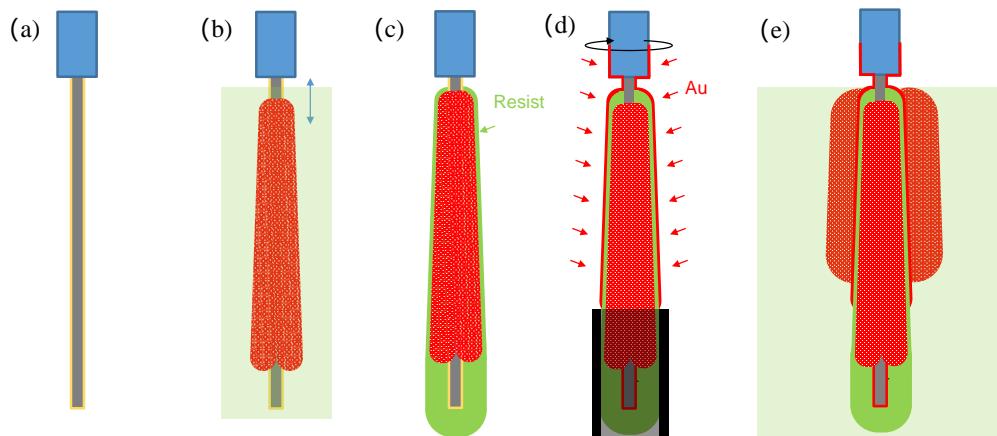


图 5.12 电镀与镀膜成型工艺原理图

(a) 定制直径  $200 \mu\text{m}$ ，直线度小于  $1 \mu\text{m}$  的玻璃棒，将其用设计夹具夹持，放入镀膜机中在玻璃棒侧面镀  $5 \text{ nm}$  的铬和  $30 \text{ nm}$  金膜，使整体导电；

(b) 放入电镀液中，控制玻璃棒进入液体的深度与电流大小得到椭球面形，使用高分辨率显微镜检查表面轮廓；

(c) 整体浸入光刻胶中后烘烤 15 分钟，形成  $2-4 \mu\text{m}$  后的有机膜，有使表面光滑和便于脱模的作用；

(d) 放入镀膜机中旋转镀膜，在有效的椭球区域内沉积  $100 \text{ nm}$  的金膜；

(e) 放入电镀液中一次电铸  $100 \mu\text{m}$  厚的镍壳使面形保持坚固稳定，

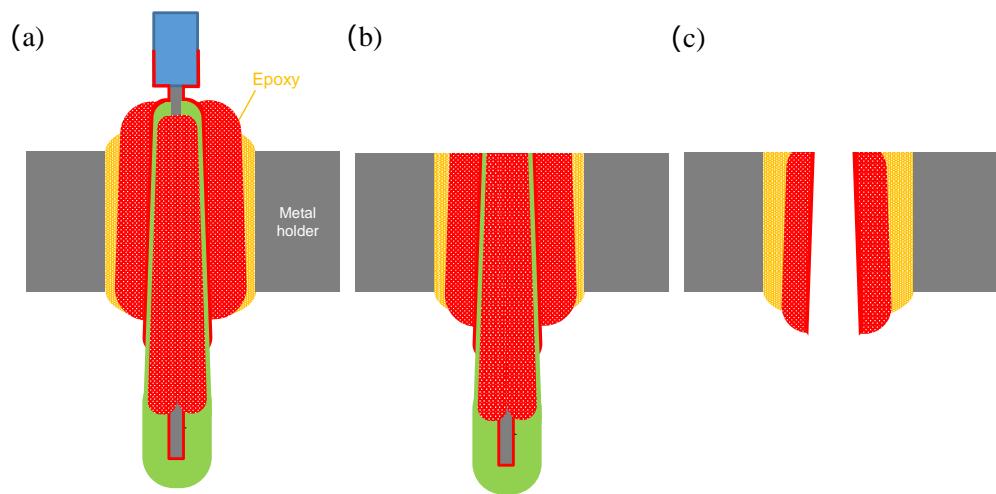


图 5.13 脱模工艺原理图

此时反射镜与芯轴还是连为一体，将整个电铸体用高强度胶水固定到金属夹具上后，如图5.13 (a)，切除直径较细的一端并用砂纸打磨抛光，如图5.13 (b)；

最后将整体放入丙酮中泡制一段时间后即可轻轻拉出芯轴，此过程中光刻胶被丙酮溶解，此时得到内表面光滑、反射材料为金的反射镜，如图5.13 (c)。

### 5.4.2 电镀成型

电镀镍是导电体浸入电解质溶液中作为阴极零件，并在其内外表面沉积镍的过程<sup>[139,143-144]</sup>。

表面镀有金属膜的玻璃棒可以在电镀液中通过控制步进深度、电流大小与每一步电镀时间得到椭圆面形。首先推导电镀镍质量  $m$  与电流  $I$  和时间  $t$  的关系如下

$$m = \frac{I \cdot t}{F} \cdot w \cdot \frac{1}{2}, \quad (5.9)$$

其中  $F$  是法拉第常数， $F=e \cdot N_A = 96485.33289 \pm 0.00059 \text{ C/mol}$ 。其中  $N_A$  是阿伏伽德罗常数， $N_A = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ， $e$  是电子电荷量， $e=1.60217663410 \times 10^{-19} \text{ C}$ ， $w$  是镍的相对原子质量， $w=58.6934$ ， $I$  是电流大小， $t$  是电镀时间。

如图5.14(a)和(b)所示，通过步进电机控制控制玻璃棒以相同的步长向下移动，每一步停留时间和电流大小不同即可以控制电镀厚度。

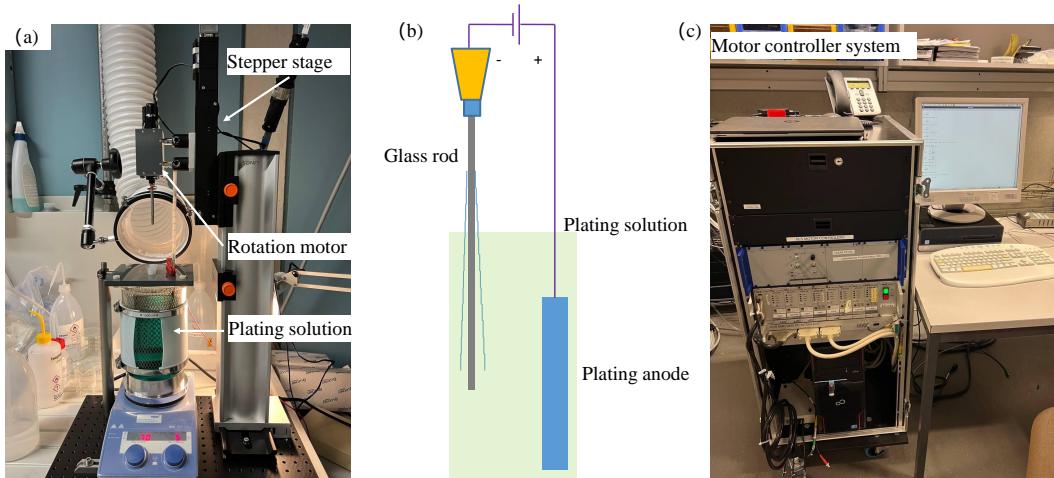


图 5.14 电镀成型原理示意图

将电镀长度为  $L$  的旋转椭球聚光镜，分成  $M$  步电镀，每一步的步长就是  $L/M \text{ mm}$ ，电镀步序为  $n, n = 1, 2, 3, 4 \dots M$ 。此时长度为  $L$  的旋转椭球聚光镜也就被离散化为  $M$  个位置点，每个点的位置序数为  $p$ ， $p = 1, 2, 3, 4 \dots M$ 。根据椭圆方程可以计算得到每个位置点的椭球横截面的半径  $T_p$ ， $p = 1, 2, 3, 4 \dots M$ ，初始玻璃棒半径为  $r_0$ ，则每个位置点  $p$  需要电镀的总厚度即为  $T_p - r_0$ 。则电镀第  $n$  步时，当前步需要电镀的厚度  $t_n$  为  $T_n - T_{n+1}$ ，每一步需要电镀的厚度可以表示为

$$\left\{ \begin{array}{l} t_1 = T_1 - T_2 \\ t_2 = T_2 - T_3 \\ t_3 = T_3 - T_3 \\ \dots \dots \\ t_n = T_n - T_{n+1} \\ \dots \dots \\ t_M = T_M \end{array} \right. \quad (5.10)$$

则第  $n$  步电镀后, 如图5.15 (b) 所示, 每个位置  $p$  的当前已电镀厚度  $H_p^n$  可以表示为:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1^n = t_1 + t_2 + t_3 + t_4 + t_5 + \dots + t_{n-1} + t_n \\ H_2^n = t_2 + t_3 + t_4 + t_5 + \dots + t_{n-1} + t_n \\ H_3^n = t_3 + t_4 + t_5 + \dots + t_{n-1} + t_n \\ H_4^n = t_4 + t_5 + \dots + t_{n-1} + t_n \\ \dots \dots \\ H_p^n = t_p + t_{p+1} + \dots + t_{n-1} + t_n \\ \dots \dots \end{array} \right. \quad (5.11)$$

当  $p > n$  时, 当前已电镀厚度  $H_p^n$  都为 0。需要计算每个位置  $p$ , 即  $p$  从 1 至  $M$ , 在第  $n$  步电镀后当前的镀层厚度, 如图5.15 (a) 所示。

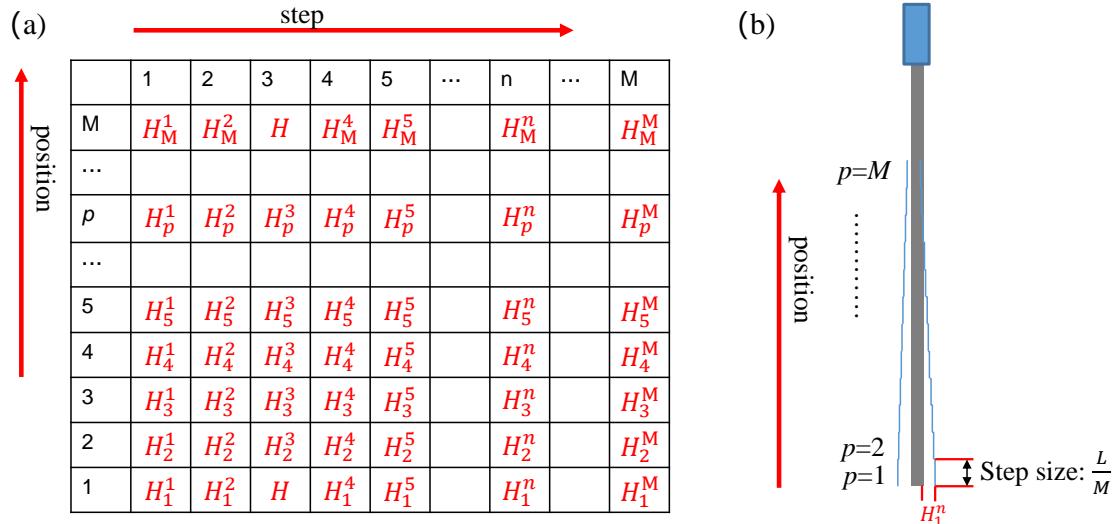


图 5.15 电镀成型原理示意图

知道第  $n$  步电镀后, 每个位置的当前已电镀厚度  $H_p^n$ , 就可以计算第  $n$  步电镀后  $p$  位置小圆柱体当前的半径, 步长  $L/N$  即为圆柱体的高, 第  $p$  个小圆柱体

在第  $n$  步电镀完之后的体积  $v_p^n$  可以表达为：

$$v_p^n = \pi \cdot \frac{L}{N} \cdot (H_p^n + r_0)^2 \circ \quad (5.12)$$

当进行  $n$  步电镀时，第  $p$  个位置的小圆柱体在第  $n$  步需要增加的体积为  $v_p^n - v_p^{n-1}$ 。因此需要增加材料的总的体积为

$$V_n = \sum_{p=1}^n v_p^n - v_p^{n-1} \circ \quad (5.13)$$

则进行  $n$  步电镀时，需要增加材料的总质量  $M_n$  为

$$M_n = V_n \cdot d \circ \quad (5.14)$$

其中， $d$  为材料密度。再根据公式 5.9，控制电流与时间乘积，即可精确控制第  $n$  步电镀材料所需质量  $M_n$ ，

$$M_n = \frac{I_n \cdot t_n}{F} \cdot w \cdot \frac{1}{2} \circ \quad (5.15)$$

电镀的表面质量与电流密度有关，我们选择合适的电流密度  $I_d$  之后，类似于上述方法计算第  $p$  个位置的小圆柱体在第  $n$  步的表面积  $S_n$ ，即可以得到电流大小  $I_n = S_n \cdot I_d$ ，再根据所需质量即可计算出每一步电镀时间。

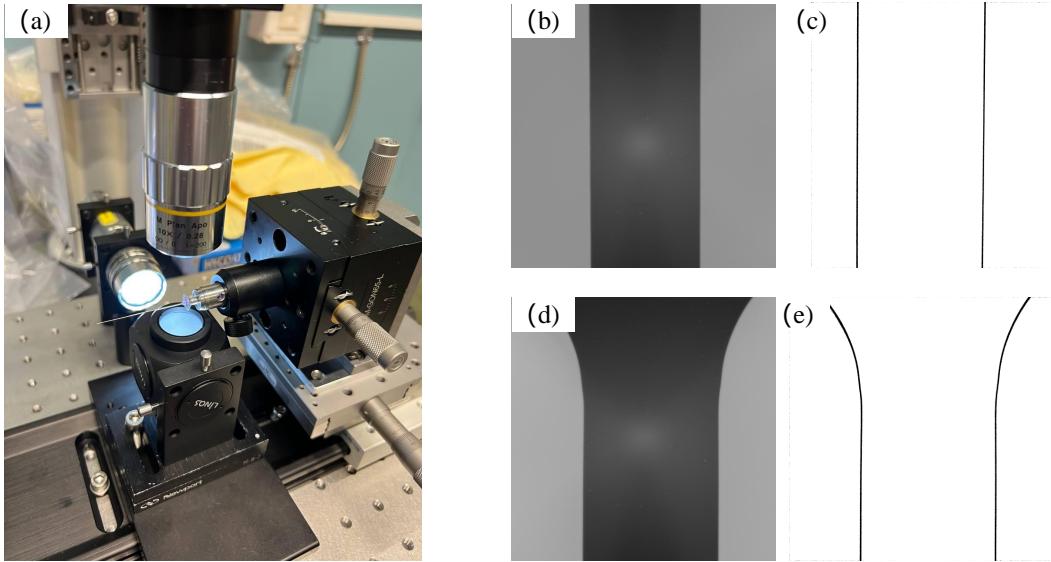


图 5.16 面形测量装置图。(a) 装置实物图，(b) 相机采集到有效椭球区域轮廓图与 (c) 轮廓提取图，(d) 相机采集到起点区域轮廓图与 (e) 轮廓提取图。

### 5.4.3 面形测量

在电镀之后的芯轴表面，需要用显微镜测量表面面形误差与直线度误差。在完成反射镜制造后，测量直径在 200 - 400  $\mu\text{m}$  的管状物体内表面轮廓十分困难，

因此我们选择在电铸前测量。分别在电镀成型之后与在光刻胶表面沉积金之后测量镜子表面轮廓与直线度，图5.16为高分辨率显微镜与5轴手动平移台组成的面形测量装置，通过提取显微镜图像的轮廓信息，计算不同位置点椭球镜直径值。

从图5.17 (a) 可以看出，两次测量椭球镜轮廓与理想面形之间具有很好的一致性，该显微镜测量分辨率为300 nm。因此低于300 nm的面形误差无法被检测到。

在直线度测量中，我们提取每个轮廓的中心位置，将中心坐标拟合后减去一条直线偏移即为椭球镜的直线度误差。从图5.17 (b) 可以看出直线度误差在 $\pm 1.5 \mu\text{m}$ 之间。

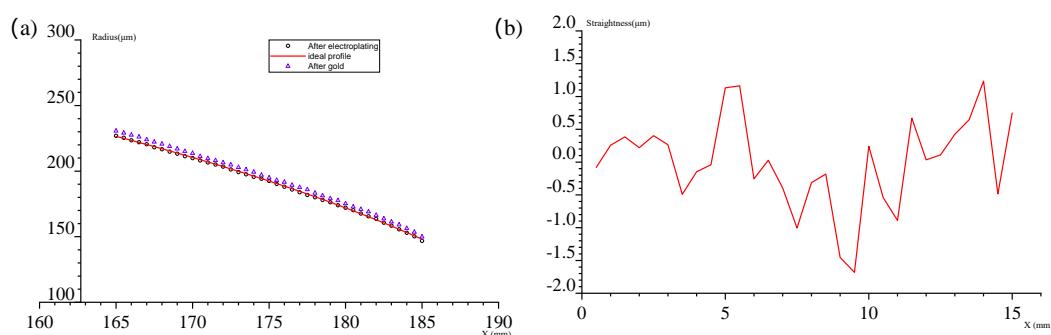


图 5.17 面形测量结果图。(a) 电镀成型之后与在光刻胶表面沉积金之后椭球镜轮廓图，(b) 椭球镜直线度测量结果。

椭球镜的面形误差与直线度误差都会影响聚焦光斑质量，导致远场图案的强度和环宽度不均匀，会降低 TXM 系统中的聚光镜效率<sup>[128,145-147]</sup>。

#### 5.4.4 热蒸发旋转镀膜

在电镀之后的芯轴表面涂覆光刻胶之后，需要镀膜机沉积100 nm厚度的金膜。由于旋转椭球聚焦镜是回转体，需要在侧壁都镀上金膜，于是将芯轴放置在真空电机带动的转台上，热蒸发金属从底部沉积在芯轴的光刻胶表面，即图5.12(d)步骤，实验装置如图5.18所示。

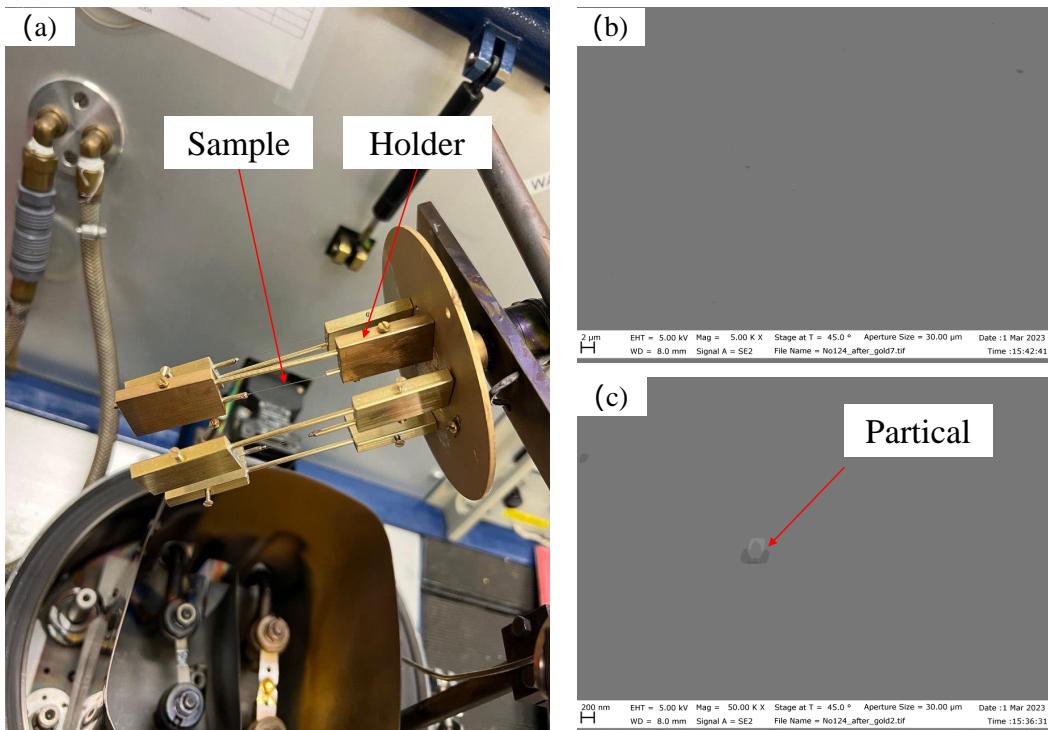


图5.18 热蒸发镀金膜。(a)热蒸发装置, (b)20000倍SEM表面质量检查, (b)50000倍SEM表面质量检查。

使用SEM检测光刻胶表面镀膜后表面有无损坏和大颗粒。有时由于误触、或者烘烤温度问题会导致光刻胶表面有气泡。之后将芯轴放入电镀液中电铸外壳，然后放入夹具中用胶水固定后，放入丙酮中脱模，如图5.19 (a) 所示。

反射镜加工完成后内表面质量检测较为困难，因此在脱模前可以将芯轴固定在一个平面上，然后使用砂纸，磨抛切除一半结构后，再放入丙酮中脱模，如图5.19(b) 所示。此时内表面未被污染，可以进行SEM和白光干涉仪粗糙度测量。

图5.20为白光干涉仪粗糙度测量结果看，内表面粗糙度在3-4 nm之间，内表面较为光滑，用SEM高倍放大后观察，有少量划痕，可能是脱模时由于摩擦引起的，5.20(c)中的圆形点是内表面少量的颗粒，可能是电镀时产生的气泡引起的，拍摄该点是为了方便找到SEM的焦点。

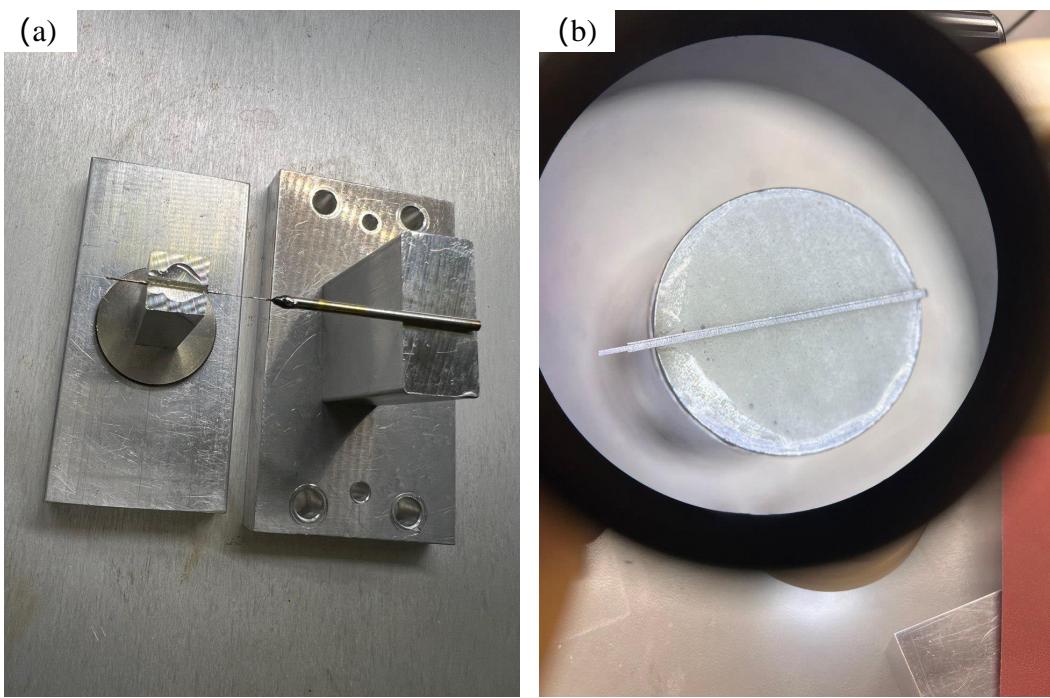


图 5.19 芯轴固定在夹具中。(a) 完整 X 射线旋转椭球聚焦镜固定, (b) 半切后, 脱模前 X 射线旋转椭球聚焦镜。

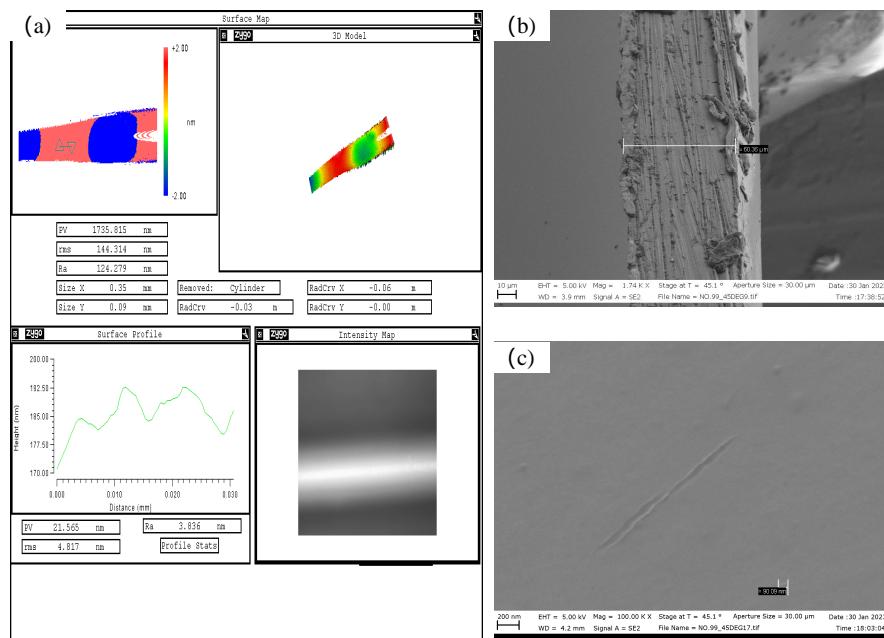


图 5.20 半切椭球镜后测试。(a)Zygo 白光干涉仪测试结果, (b)SEM 下 1700 倍切口边缘图, (c)SEM 下 100000 倍内表面图。

## 5.5 桌面X光机测试聚焦镜

加工完成的X射线椭球聚焦镜如图5.21所示，此端为透镜直径较大一侧，可以看出内表面有皱纹，因为底部镀金膜不均匀，导致镍沉积时部分金膜发生移动变形，但是不影响整体质量。将X射线旋转椭球聚焦镜放在五轴平移台上进行测量聚焦效果。X光机为日本滨松光子L10101微焦点光源。X射线探测器为闪烁体、可见光光学系统与制冷相机搭配组成的，单像素空间分辨率为 $5\text{ }\mu\text{m}$ ，像素个数 $2048 \times 2048$ ，数据读出位数为16 bit。

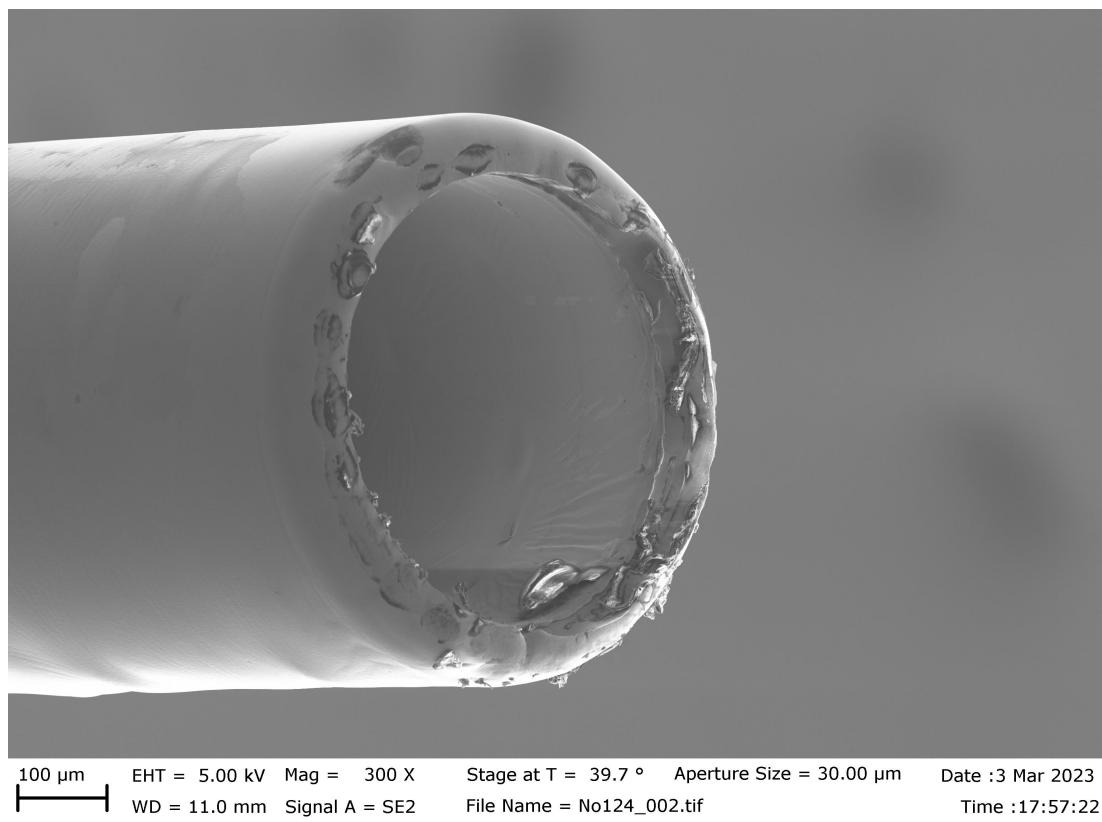


图 5.21 脱模后的 X 射线聚焦镜 SEM 图

X光机电压设置在40 kV，电流 $200\text{ }\mu\text{A}$ 。在利用五轴平移台调整X射线聚焦镜后，找到亮度最大值所在位置即为调整合格。图5.23(a)、(b)、(c)分别展示了半切的X射线聚焦镜，完全的X射线聚焦镜与光束阻挡器搭配以及单独的X射线聚焦镜测试结果。

图5.23(d)显示的是5.23(c)图中聚光光斑强度分布的三维图，此时聚光光斑半高宽约为 $500\text{ }\mu\text{m}$ 。X光机源尺寸为 $10\text{ }\mu\text{m}$ ，根据几何放大倍数计算，聚光光斑半高宽的理论值在 $350\text{ }\mu\text{m}$ ，实际光斑尺寸大于理论值是由于聚光镜表面面型误差与直线度误差引起的，聚光光束有散射，后续可以优化加工工艺，提升加工与检测精度，使得聚光光束能量更加集中。

将 $70\text{ }\mu\text{m}$ 的小孔放置在聚光点上游挡住杂散光，X射线相机移动至焦点下游

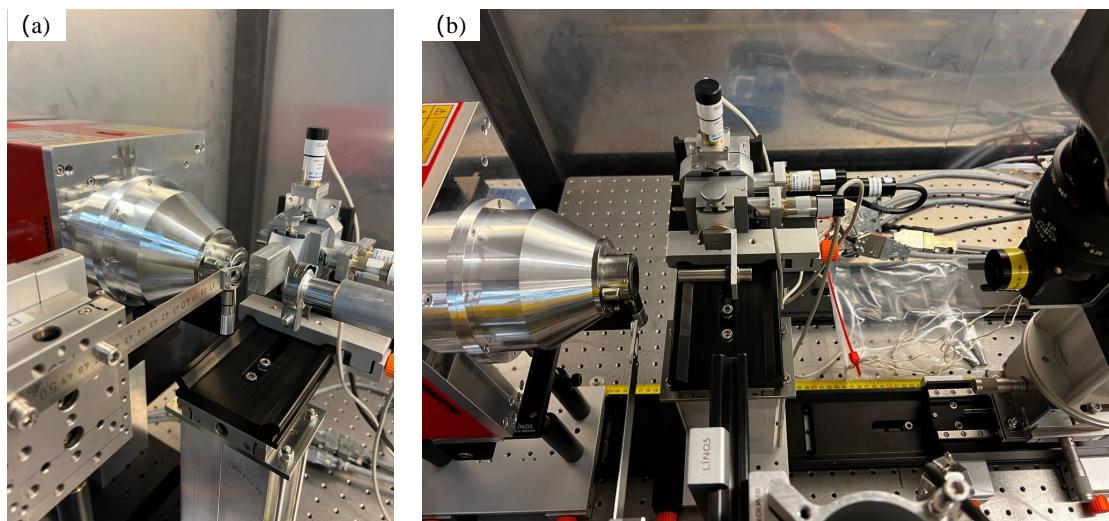


图 5.22 X 光机聚焦镜测试装置。(a) 近景图, (b) 全局图。

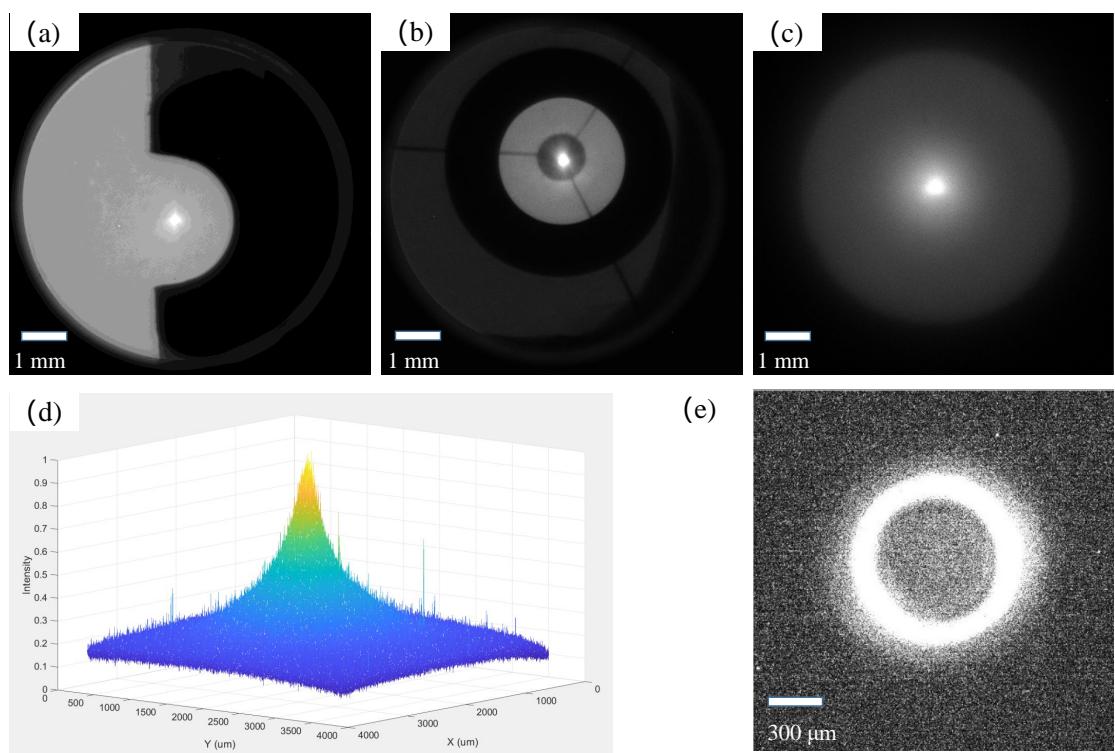


图 5.23 聚焦镜测试结果。(a) 半切的 X 射线聚焦镜, (b) 完全的 X 射线聚焦镜搭配光束阻挡器, (c) 单独的 X 射线聚焦镜测试结果, (d) 显示的是 (c) 图中强度分布的三维图, (e) 使用小孔屏蔽杂散光后的圆环光束。

可以看到清晰地圆环光束。图5.23(e)显示的是X射线相机距离聚焦点1.3 m处，曝光时间30分钟采集到的圆环图像。该圆环光束分布均匀，具有较好的光束质量。

将直径30 μm的小孔放于紧贴聚焦镜出口位置，X射线相机放置在焦点位置。在XY平面内分别移动小孔至(a)(b)(c)(d)四个位置，可以选择某一圆形区域的反射光进入X射线探测器。此时图5.24中的白色圆形是直通光照射小孔的投影，细线形光束是反射的光束。可以看出，反射光的散射效果十分明显，可能是表面轮廓误差、电镀时产生气泡造成表面质量较差等因素引起的。<sup>[148]</sup>。

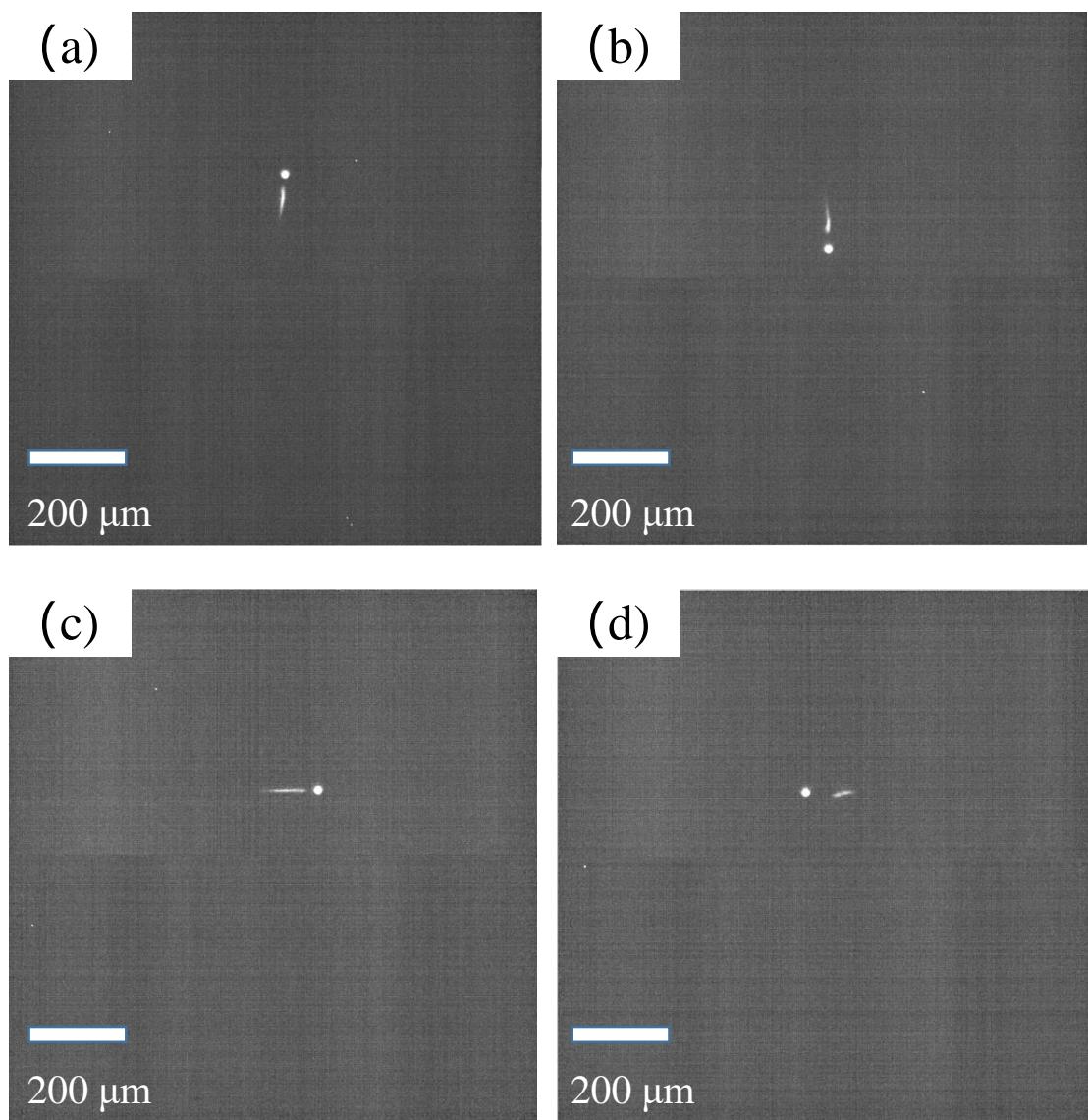


图5.24 小孔放于紧贴聚焦镜出口位置，在XY平面内分别移动至(a)(b)(c)(d)四个位置。

## 5.6 消色差X射线显微镜成像实验

将测试完成的X射线旋转椭球聚光镜安装至搭建的透射式消色差X射线显微镜上，该显微镜使用由X射线旋转椭球聚光镜作为聚光器(Condenser)进行反射式聚焦，中心光束由光束阻挡器(Central stop)阻挡，杂散光由小孔(Pin hole)阻挡，聚光器收集一定立体角内的光子后，形成空心光锥汇聚到另一焦点打到样品上，使用集成式消色差X射线透镜作为物镜，通过调整显微镜样品与X射线探测器距离，成像放大倍率为12倍，能谱为钨靶X光机在50kV, 200μA下的发射谱，在8.3kev和9.6kev有两条特征谱线。光路管道中通入氦气，降低X射线传播中的损耗。

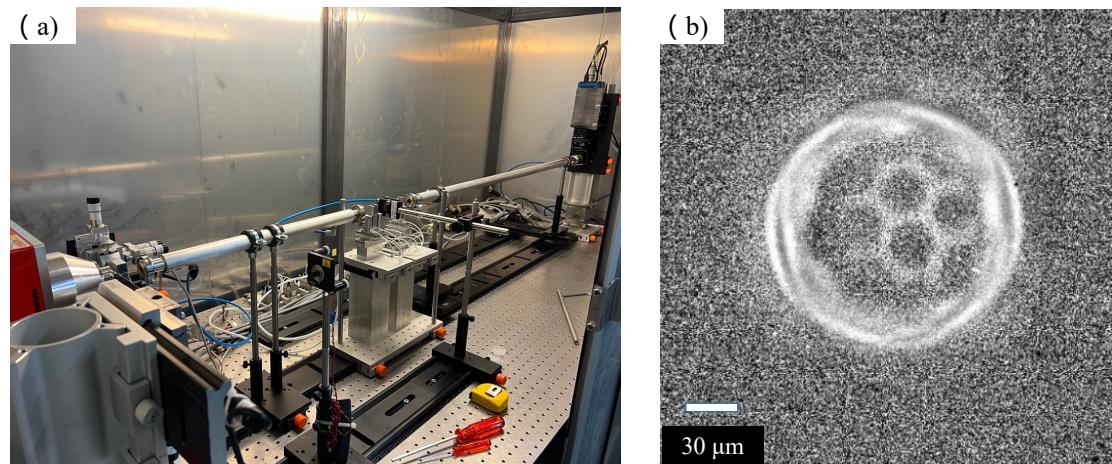


图 5.25 X 射线显微镜装置 (a) 与成像结果图 (b)

目前的消色差X射线显微镜初步得到成像结果，如图样品为周期为25.4μm的周期性六边形结构，此时在样品上空间分辨率为200nm左右。因为X射线探测器空间分辨率为5μm，消色差透镜放大倍率为10倍。后续将升级X射线探测器使其空间分辨率达到0.65μm，但当前透镜的分辨率受菲涅尔波带片最外环区间尺寸限制<sup>[95]</sup>，此透镜下，理论的消色差X射线显微镜分辨率为100nm。后续升级X射线消色差透镜，有望将显微镜分辨率在硬X射线波段做到50nm甚至10nm分辨率。

## 5.7 小结

本章介绍X射线旋转椭球聚光镜关键技术的研制。

桌面级消色差X射线显微镜相较于传统的投影式X射线显微镜，使用精密X射线椭球聚光镜提供高亮度照明，结合消色差X射线透镜作为物镜提供大于10倍的放大成像。整体上成像分辨率可比投影式显微镜提高1-2个数量级。

本章重点集中于研制出消色差X射线显微镜关键光学器件-金反射面X射线

旋转椭球聚焦镜。开发了成套小口径 X 射线旋转椭球聚焦镜制造工艺，包括反射镜设计、电镀成型、面形测量、镀膜电铸工艺，脱模工艺等，X 射线椭球聚焦镜照明角在 1 mrad 匹配消色差透镜 NA，实现大立体角范围的光子收集与高效聚焦；仿真了集成式消色差 X 射线透镜复色光焦点变化；最后将聚焦镜测试并安装在消色差 X 射线显微镜上，取得了优于 200 nm 的成像分辨率。

其中电镀成型作为该工艺的核心步骤，文章详细说明了电镀面形的原理与算法，电镀加工理论上可以获得纳米级的加工精度。通过光刻胶润滑技术为反射镜带来超光滑内表面，替代了传统的抛光加工。

但是目前该期间表面粗糙度在 1-5 nm 之间，达到 1 nm 以下的粗糙度，聚焦后光斑亮度还能提高一倍以上，需要优化光刻胶烘干工艺与涂覆方法使其表面更加光滑。

精密 X 射线椭球聚焦镜作为关键器件，将来可被用于微聚焦 X 射线荧光，微聚焦 X 射线相衬成像、X 射线衍射测量，光谱测定和同步加速器光束线上。

## 第 6 章 总结与展望

### 6.1 论文主要研究工作总结

在线波前检测对同步辐射光源与 X 射线自由电子激光等高性能光源实验技术开发至关重要，光栅干涉法由于具有极高的角度灵敏度（ $10 \text{ nrad}$  量级）、抗干扰性好、原位与工作波长下无损检测等优点，已经被广泛用于波前传感、工作波长下面形测量和 XFEL 光束质量评价。

本文在理论和实验层面深入探讨了 X 射线波前传播的基础理论、光栅干涉测量原理，开发出微焦点光源光栅干涉仪用于波前检测与面形测量，角度灵敏度优于  $100 \text{ nrad}$ ，测量结果与 LTP 对比具有很好的一致性。为同步辐射光源以及自由电子激光等高性能光源开发提供关键技术支撑。同时作为独立的实验仪器，也可做为 X 射线反射镜、折射透镜以及衍射透镜的计量工具；在镜体加工制造过程面型反馈、X 射线自适应光学反馈的反馈调节等领域提供实时波前测量；在波前反馈策略与控制算法开发，波前调控机器学习训练集数据收集等方面也有广阔应用前景。

主要工作包括，建立微焦点 X 射线光栅干涉仪用于波前传感与反射镜面形测量的理论模型，推导出 X 射线反射镜表面斜率误差与干涉条纹相位关系；模拟了整个系统在多种参数作用下的成像结果，证明该设计可以获得很好的图像可见度。设计并搭建了微焦点 X 射线光栅干涉仪实验平台，完成其整体机械设计、加工和安装调试；控制系统电路设计、焊接与装配；图像采集上位机软件编写、调试；监控系统设计与装调，并总结一套 X 射线光栅干涉仪面形测量实验技术。开发了 Moiré 条纹模式、机械式与电磁式相位步进算法恢复相位算法。

另一方面，在精密 X 射线光学器件制造领域，本文开发了 X 射线椭球聚光镜用做 X 射线显微镜的核心器件。桌面级消色差 X 射线显微镜利用集成式消色差 X 射线透镜替代菲涅尔波带片，前者可将复色 X 射线聚焦到同一焦点附近，对于普通 X 光机的复色能谱，消色差透镜成像色差小，光通量更高，更具优势。本文开发 X 射线聚光光学器件制造技术，结合集成式消色差 X 射线透镜，成功开发桌面级消色差 X 射线显微镜，实现了  $200 \text{ nm}$  空间分辨率的成像。

主要工作包括：反射镜设计；电镀成型装置搭建、理论推导、算法开发；面形测量；镀膜电铸工艺开发；脱模工艺开发等；研究了消色差透镜原理给出了消色差透镜焦距计算公式，并成功搭建桌面级消色差 X 射线显微镜。

精密 X 射线椭球聚光镜作为关键 X 射线光学器件，还可以应用于微聚光 X 射线荧光、微聚焦 X 射线相衬成像、X 射线衍射测量、光谱测定以及同步加速器光束线上的多个领域。

本文创新点主要包括：

1. 首次在微焦点 X 射线光栅干涉仪实验平台实现在线波前检测与反射镜面形测量，推导出 X 射线反射镜表面斜率误差与干涉条纹相位关系，提出使用反射镜直通光作为参考光束用于相位提取，分别利用相位步进和傅立叶条纹分析技术，重建条纹的相位及波前曲率半径分布，进而计算出波前角度和镜面斜率误差分布，面形测量结果与 LTP 比对具有很好的一致性，波前检测角度灵敏度优于 100 nrad。
2. 提出一种电磁相位步进方法用于 X 射线反射镜面形测量，使用自制的通电螺线管，通入电流时产生磁场驱动 X 射线光源电子束移动，实现光源点的相位步进，测量结果与机械式相位步进和 Moiré 条纹模式相比提高了系统稳定性与速度。
3. 研制出金反射面 X 射线旋转椭球聚焦镜。开发了成套 X 射线旋转椭球聚焦镜制造工艺，包括反射镜设计、电镀成型、面形测量、镀膜电铸工艺，脱模工艺等；仿真了集成式消色差 X 射线透镜复色光焦点变化；在 X 光机下测试聚焦镜性能，在直径 100 μm 大小的面内，获得 10 倍的光通量提升；将聚焦镜安装在搭建的消色差 X 射线显微镜装置上，获得了优于 200 nm 的空间成像分辨率。

## 6.2 研究内容展望

同步辐射是 X 射线光学技术的核心应用领域之一。随着新型的加速器和储存环的不断发展，同步辐射源的亮度和分辨率将继续提高，为更深入的材料研究、生命科学研究、纳米技术等领域提供更强大的工具。目前 X 射线光学技术的发展落后于光源技术，需要更加先进的光学制造与检测手段。

本文开发的 X 射线旋转椭球聚焦镜没有测量波前分布，后期可以利用光栅干涉仪表征聚焦镜聚焦的焦点波前。

与传统的线状光源不同，微焦点光源在 X 方向和 Y 方向上都具有较小的焦斑尺寸，并且满足了空间相干性要求。因此，这个系统可以进一步拓展应用到二维光栅干涉仪中，以进行二维波前传感和面形测量技术的研究。借助更强亮度的 X 射线源，可以提高光通量，实现更高精度和更快的测量速度。

傅立叶分析技术更适合于 X 射线自由电子激光脉冲的波前测量，X 射线自由电子激光的聚焦脉冲点只有 1-5 μm，但是相邻两个脉冲之间聚焦点的位置可能会偏移 10 -20 μm。因此，Ptychography<sup>[31,149-150]</sup> 和散斑法<sup>[25,151]</sup> 等需要长时间扫描的波前重建算法，不能适用于 X 射线自由电子激光，而光栅干涉法只需要单幅图像就可重建出波前相位分布。

X 射线旋转椭球聚焦镜的加工工艺同样可以拓展到多层膜聚焦镜领域，加

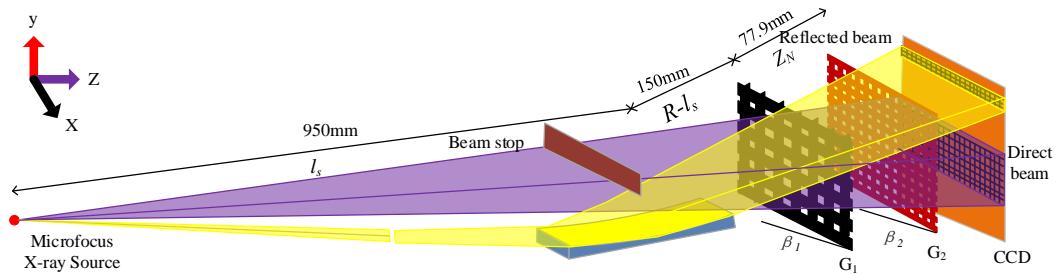


图 6.1 二维光栅干涉仪波前表征示意图

工出的多层膜 X 射线反射聚焦镜可使普通 X 射线光源在聚焦和准直后亮度提高 2-4 个数量级，该光学器件可被用于微聚焦 X 射线荧光，微聚焦 X 射线相衬成像、X 射线衍射测量、光谱测定和同步加速器射束线上。包括用于各种领域和针对微焦点光源的多层膜 X 射线光学器件，匹配微焦点 X 射线源可用来升级 X 射线分析设备，如计算机化的光学器件模拟、各类衬底的生产和薄膜表征。

在提升表面光滑度方面，可以结合电镀成型的精密加工优势与化学机械抛光，使用纳米颗粒喷射抛光，可以实现光学零件纳米级粗糙度、无表面损伤的精确抛光。液体喷射抛光技术系统如图所示，高压泵将纳米颗粒溶液以一定的压强喷射到聚光镜芯轴表面，利用冲击力实现少量材料去除与修饰。通过控制在某些区域喷射抛光时间与压强，即可实现元件的定量修整。

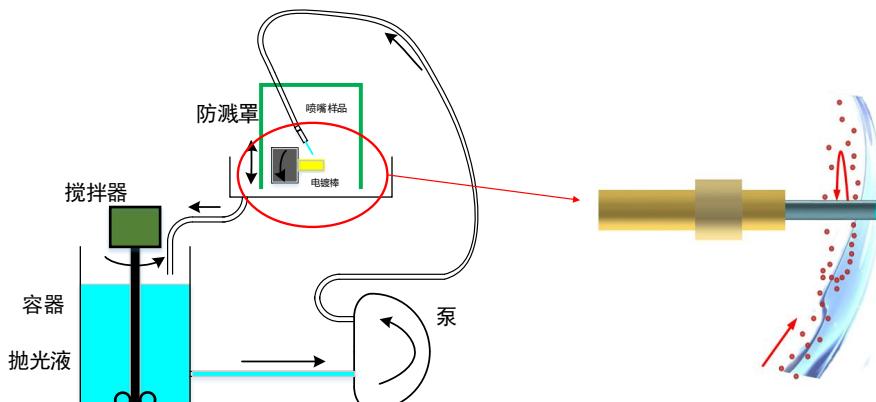


图 6.2 液体喷射抛光技术

而桌面级消色差 X 射线显微镜的诞生，使得普通 X 光机复色谱也能做显微成像，会将原有桌面实验速度提升 1-2 个数量级，带来更快速、更精确的分析手段，大大推动科学研究与产业检测设备的应用。

## 参 考 文 献

- [1] HOLLER M, ODSTRCIL M, GUIZAR-SICAIROS M, et al. Three-dimensional imaging of integrated circuits with macro-to nanoscale zoom[J]. *Nature Electronics*, 2019, 2(10): 464-470.
- [2] WANG F, ZHOU P, LI K, et al. Sensitive imaging of intact microvessels in vivo with synchrotron radiation[J]. *IUCrJ*, 2020, 7(5): 793-802.
- [3] RUTISHAUSER S. X-ray grating interferometry for imaging and metrology[D]. ETH Zurich, 2013.
- [4] KRAFT P. Pilatus 2m: a detector for small angle x-ray scattering[D]. ETH Zurich, 2010.
- [5] FUCHS M, WEINGARTNER R, POPP A, et al. Laser-driven soft-x-ray undulator source[J]. *Nature physics*, 2009, 5(11): 826-829.
- [6] 赵振堂, 王东, 等. 更亮与更快: X 射线自由电子激光的前景与挑战[J]. 物理, 2015, 44(7): 456-457.
- [7] 李鹏, 黎明, 吴岱, 等. 我国自由电子激光技术发展战略研究[J]. 中国工程科学, 2020, 22(3): 35-41.
- [8] GOODMAN J W. Statistical optics[M]. John Wiley & Sons, 2015.
- [9] 王志立. X 射线光栅相位衬度成像研究[D]. 中国科学院研究生院, 2011.
- [10] 齐开国. 简明统计光学[M]. 中国科学技术大学出版社, 2021.
- [11] 戚俊成, 叶琳琳, 陈荣昌, 等. 第三代同步辐射光源 X 射线相干性测量研究[J]. 物理学报, 2014(10): 122-130.
- [12] BERUJON S. At-wavelength metrology of hard x-ray synchrotron beams and optics[D]. PhD thesis, ESRF, Grenoble, France (<http://www.theses.fr/en/2013GRENY010>), 2013.
- [13] MOMOSE A, YASHIRO W, TAKEDA Y, et al. Phase tomography by x-ray talbot interferometry for biological imaging[J]. *Japanese journal of applied physics*, 2006, 45(6R): 5254.
- [14] BERUJON S, WANG H, ALCOCK S, et al. At-wavelength metrology of hard x-ray mirror using near field speckle[J]. *Optics express*, 2014, 22(6): 6438-6446.
- [15] 苏显渝, 李继陶. 信息光学[M]. 科学出版社, 1999.
- [16] GOODMAN J W. Introduction to fourier optics[M]. Roberts and Company publishers, 2005.
- [17] 钱晓凡. 信息光学数字实验室: Matlab 版[M]. 科学出版社, 2015.
- [18] IRICK S C. Improved measurement accuracy in a long trace profiler: compensation for laser pointing instability[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1994, 347(1-3): 226-230.
- [19] 罗红心, 王劼, 肖体乔, 等. 同步辐射用光学元件的检测[J]. 中国激光, 2009, 36(s2):

- 134-139.
- [20] ROMMEVEAUX A V, LANTELME B, BARRETT R. Esrf metrology laboratory: overview of instrumentation, measurement techniques, and data analysis[J]. Advances in Metrology for X-Ray and EUV Optics III, 2010, 7801: 47-57.
- [21] 林维豪, 罗红心, 宋丽, 等. 同步辐射用光学元件面形绝对检测方法的研究[J]. 光学学报, 2012, 32(9): 0912005.
- [22] WANG H, MORICONI S, SAWHNEY K. Nano-precision metrology of x-ray mirrors with laser speckle angular measurement[J]. Light: Science & Applications, 2021, 10(1): 195.
- [23] IDIR M, MERCERE P, MODI M H, et al. X-ray active mirror coupled with a hartmann wavefront sensor[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2010, 616(2-3): 162-171.
- [24] KEITEL B, PLÖNJES E, KREIS S, et al. Hartmann wavefront sensors and their application at flash[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2016, 23(1): 43-49.
- [25] XUE L, LI Z, ZHOU T, et al. Absolute metrology method of the x-ray mirror with speckle scanning technique[J]. Applied Optics, 2019, 58(31): 8658-8664.
- [26] 李凡, 康乐, 杨福桂, 等. 基于 X 射线近场散斑的波前检测技术研究现状[J]. 光学学报, 2022, 42(8): 0800002.
- [27] KASHYAP Y, WANG H, SAWHNEY K. Experimental comparison between speckle and grating-based imaging technique using synchrotron radiation x-rays[J]. Optics express, 2016, 24(16): 18664-18673.
- [28] WANG H, KASHYAP Y, LAUNDY D, et al. Two-dimensional in situ metrology of x-ray mirrors using the speckle scanning technique[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2015, 22 (4): 925-929.
- [29] KEWISH C M, THIBAULT P, DIEROLF M, et al. Ptychographic characterization of the wavefield in the focus of reflective hard x-ray optics[J]. Ultramicroscopy, 2010, 110(4): 325-329.
- [30] LYUBOMIRSKIY M, KOCH F, ABRASHITOVA K, et al. Ptychographic characterisation of polymer compound refractive lenses manufactured by additive technology[J]. Optics express, 2019, 27(6): 8639-8650.
- [31] VILA-COMAMALA J, DIAZ A, GUIZAR-SICAIROS M, et al. Characterization of a 20-nm hard x-ray focus by ptychographic coherent diffractive imaging[C]//Advances in X-Ray/EUV Optics and Components VI: volume 8139. SPIE, 2011: 141-147.
- [32] DIEROLF M, BUNK O, KYNDE S, et al. Ptychography & lensless x-ray imaging[J]. Euro-physics News, 2008, 39(1): 22-24.
- [33] KIMURA T, MIMURA H, HANDA S, et al. Wavefield characterization of nearly diffraction-

- limited focused hard x-ray beam with size less than 10 nm[J]. Review of scientific instruments, 2010, 81(12): 123704.
- [34] ZHAO S, YANG Y, SHEN Y, et al. Optics metrology and at-wavelength wavefront characterization by a microfocus x-ray grating interferometer[J]. Opt. Express, 2021, 29(14): 22704-22713.
- [35] ZHAO S, WANG K Y, CHENG G Y, et al. X-ray wavefront characterization with grating interferometry using an x-ray microfocus laboratory source[C]//Advances in Metrology for X-Ray and EUV Optics IX: volume 11492. International Society for Optics and Photonics, 2020: 114920Q.
- [36] KAYSER Y, DAVID C, FLECHSIG U, et al. X-ray grating interferometer for *in situ* and at-wavelength wavefront metrology[J/OL]. Journal of Synchrotron Radiation, 2017, 24(1): 150-162. <https://doi.org/10.1107/S1600577516017562>.
- [37] KAYSER Y, RUTISHAUSER S, KATAYAMA T, et al. Wavefront metrology measurements at sacla by means of x-ray grating interferometry[J]. Optics express, 2014, 22(8): 9004-9015.
- [38] WANG H, SAWHNEY K, BERUJON S, et al. X-ray wavefront characterization using a rotating shearing interferometer technique[J]. Optics express, 2011, 19(17): 16550-16559.
- [39] WEITKAMP T, NÖHAMMER B, DIAZ A, et al. X-ray wavefront analysis and optics characterization with a grating interferometer[J]. Applied Physics Letters, 2005, 86(5): 054101.
- [40] MARATHE S, WOJCIK M J, KUJALA N G, et al. Development of grating-based hard x-ray talbot interferometry for optics and beam wavefront characterization at the advanced photon source[C]//Advances in Metrology for X-Ray and EUV Optics IV: volume 8501. International Society for Optics and Photonics, 2012: 85010J.
- [41] BERUJON S, ZIEGLER E. Grating-based at-wavelength metrology of hard x-ray reflective optics[J]. Optics letters, 2012, 37(21): 4464-4466.
- [42] KAYSER Y, RUTISHAUSER S, KATAYAMA T, et al. Shot-to-shot diagnostic of the longitudinal photon source position at the spring-8 angstrom compact free electron laser by means of x-ray grating interferometry[J]. Optics Letters, 2016, 41(4): 733-736.
- [43] THIBAULT P, DIEROLF M, MENZEL A, et al. High-resolution scanning x-ray diffraction microscopy[J]. Science, 2008, 321(5887): 379-382.
- [44] KUBEC A, BRAUN S, NIESE S, et al. Ptychography with multilayer laue lenses[J]. Journal of synchrotron radiation, 2014, 21(5): 1122-1127.
- [45] HÖNIG S, HOPPE R, PATOMMEL J, et al. Full optical characterization of coherent x-ray nanobeams by ptychographic imaging[J]. Optics Express, 2011, 19(17): 16324-16329.
- [46] PFEIFFER F, WEITKAMP T, BUNK O, et al. Phase retrieval and differential phase-contrast imaging with low-brilliance x-ray sources[J]. Nature physics, 2006, 2(4): 258-261.

- 
- [47] RUTISHAUSER S, SAMOYLOVA L, KRZYWINSKI J, et al. Exploring the wavefront of hard x-ray free-electron laser radiation[J]. *Nature communications*, 2012, 3(1): 1-6.
  - [48] RUTISHAUSER S, BEDNARZIK M, ZANETTE I, et al. Fabrication of two-dimensional hard x-ray diffraction gratings[J]. *Microelectronic Engineering*, 2013, 101: 12-16.
  - [49] WANG H, BERUJON S, PAPE I, et al. X-ray wavefront characterization of a fresnel zone plate using a two-dimensional grating interferometer[J]. *Optics Letters*, 2013, 38(6): 827-829.
  - [50] LIU Y, SEABERG M, ZHU D, et al. High-accuracy wavefront sensing for x-ray free electron lasers[J]. *Optica*, 2018, 5(8): 967-975.
  - [51] MAKITA M, SENIUTINAS G, SEABERG M H, et al. Double grating shearing interferometry for x-ray free-electron laser beams[J]. *Optica*, 2020, 7(5): 404-409.
  - [52] DRESSELHAUS J L, FLECKENSTEIN H, DOMARACKÝ M, et al. Precise wavefront characterization of x-ray optical elements using a laboratory source[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2022, 93(7).
  - [53] RUTISHAUSER S, RACK A, WEITKAMP T, et al. Heat bump on a monochromator crystal measured with x-ray grating interferometry[J]. *Journal of synchrotron radiation*, 2013, 20(2): 300-305.
  - [54] KAYSER Y, DAVID C, FLECHSIG U, et al. X-ray grating interferometer for in situ and at-wavelength wavefront metrology[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2017, 24(1): 150-162.
  - [55] DIAZ A, MOCUTA C, STANGL J, et al. Coherence and wavefront characterization of si-111 monochromators using double-grating interferometry[J]. *Journal of synchrotron radiation*, 2010, 17(3): 299-307.
  - [56] WANG H, SAWHNEY K, BERUJON S, et al. Fast optimization of a bimorph mirror using x-ray grating interferometry[J]. *Optics letters*, 2014, 39(8): 2518-2521.
  - [57] RUTISHAUSER S, ZANETTE I, WEITKAMP T, et al. At-wavelength characterization of refractive x-ray lenses using a two-dimensional grating interferometer[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 99(22): 221104.
  - [58] WANG H, BERUJON S, SAWHNEY K. Characterization of a one dimensional focusing compound refractive lens using the rotating shearing interferometer technique[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1466. American Institute of Physics, 2012: 223-228.
  - [59] MARATHE S, SHI X, WOJCIK M J, et al. Probing transverse coherence of x-ray beam with 2-d phase grating interferometer[J]. *Optics express*, 2014, 22(12): 14041-14053.
  - [60] SEABERG M, COJOCARU R, BERUJON S, et al. Wavefront sensing at x-ray free-electron lasers[J]. *Journal of synchrotron radiation*, 2019, 26(4): 1115-1126.

## 参 考 文 献

---

- [61] ZIEGLER E, PEVERINI L, KOZHEVNIKOV I, et al. On-line mirror surfacing monitored by x-ray shearing interferometry and x-ray scattering[C]//AIP Conference Proceedings: volume 879. American Institute of Physics, 2007: 778-781.
- [62] TALBOT H F. Lxxvi. facts relating to optical science. no. iv[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1836, 9(56): 401-407.
- [63] DAVID C, RUTISHAUSER S, SPRUNG M, et al. X-ray grating interferometry-applications in metrology and wave front sensing[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1466. American Institute of Physics, 2012: 23-28.
- [64] WEITKAMP T, ZANETTE I, PFEIFFER F, et al. Design aspects of x-ray grating interferometry[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1466. American Institute of Physics, 2012: 84-89.
- [65] HERZEN J. A grating interferometer for materials science imaging at a second-generation synchrotron radiation source[D]. Staats-und Universitätsbibliothek Hamburg Carl von Ossietzky, 2010.
- [66] YUAN J, WU C, LI Y, et al. Integer and fractional electromagnetically induced talbot effects in a ladder-type coherent atomic system[J]. Optics express, 2019, 27(1): 92-101.
- [67] ZANETTE I. Interférométrie x à réseaux pour l'imagerie et l'analyse de front d'ondes au synchrotron[D]. Université de Grenoble, 2011.
- [68] 答贵彬. X 射线微结构阵列光源光栅相衬成像系统研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2019.
- [69] 胡仁芳. X 射线光栅相位衬度成像实验技术和应用研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2017.
- [70] LOVRIC G, OBERTA P, MOHACSI I, et al. A robust tool for photon source geometry measurements using the fractional talbot effect[J]. Optics Express, 2014, 22(3): 2745-2760.
- [71] GUIGAY J P. On fresnel diffraction by one-dimensional periodic objects, with application to structure determination of phase objects[J]. Optica Acta: International Journal of Optics, 1971, 18(9): 677-682.
- [72] HIPP A, WILLNER M, HERZEN J, et al. Energy-resolved visibility analysis of grating interferometers operated at polychromatic x-ray sources[J]. Optics express, 2014, 22(25): 30394-30409.
- [73] THUERING T, STAMPANONI M. Performance and optimization of x-ray grating interferometry[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2014, 372(2010): 20130027.
- [74] GROMANN L B, BEQUÉ D, SCHERER K, et al. Low-dose, phase-contrast mammography with high signal-to-noise ratio[J]. Biomedical optics express, 2016, 7(2): 381-391.

## 参 考 文 献

---

- [75] MESHALKIN A Y, PODLIPNOV V, USTINOV A, et al. Analysis of diffraction efficiency of phase gratings in dependence of duty cycle and depth[C]//Journal of Physics: Conference Series: volume 1368. IOP Publishing, 2019: 022047.
- [76] WANG Z, ZHU P, HUANG W, et al. Analysis of polychromaticity effects in x-ray talbot interferometer[J]. Analytical and bioanalytical chemistry, 2010, 397: 2137-2141.
- [77] WEITKAMP T, DAVID C, KOTTLER C, et al. Tomography with grating interferometers at low-brilliance sources[C]//Developments in X-ray Tomography V: volume 6318. SPIE, 2006: 249-258.
- [78] WEITKAMP T, DIAZ A, NOHAMMER B, et al. Moiré interferometry formulas for hard x-ray wavefront sensing[C]//Advances in Mirror Technology for X-Ray, EUV Lithography, Laser, and Other Applications II: volume 5533. International Society for Optics and Photonics, 2004: 140-144.
- [79] ENGELHARDT M, KOTTLER C, BUNK O, et al. The fractional talbot effect in differential x-ray phase-contrast imaging for extended and polychromatic x-ray sources[J]. Journal of microscopy, 2008, 232(1): 145-157.
- [80] ZANETTE I, DAVID C, RUTISHAUSER S, et al. 2d grating simulation for x-ray phase-contrast and dark-field imaging with a talbot interferometer[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1221. American Institute of Physics, 2010: 73-79.
- [81] SIEWERT F, BUCHHEIM J, BOUTET S, et al. Ultra-precise characterization of lcls hard x-ray focusing mirrors by high resolution slope measuring deflectometry[J]. Optics express, 2012, 20(4): 4525-4536.
- [82] BIRNBACHER L, WILLNER M, VELROYEN A, et al. Experimental realisation of high-sensitivity laboratory x-ray grating-based phase-contrast computed tomography[J]. Scientific reports, 2016, 6(1): 24022.
- [83] MODREGGER P, PINZER B, THÜRING T, et al. Sensitivity of x-ray grating interferometry [J]. Optics express, 2011, 19(19): 18324-18338.
- [84] THUERING T, MODREGGER P, HÄMMERLE S, et al. Sensitivity in x-ray grating interferometry on compact systems[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1466. American Institute of Physics, 2012: 293-298.
- [85] 韩华杰. X 射线光栅相衬成像医学应用与实验技术研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2018.
- [86] 王圣浩. X 射线光栅相位衬度成像技术和方法研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2015.
- [87] 吴朝. X 射线光栅相衬成像中的信息分离以及计算机断层重建[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2014.
- [88] 赵帅, 王秋平, 张磊, 等. 基于微焦点 X 射线光栅干涉仪的波前传感与面形测量技术[J].

- Acta Optica Sinica, 2022, 42(23): 2334002-2334002.
- [89] MIAO H, CHEN L, BENNETT E E, et al. Motionless phase stepping in x-ray phase contrast imaging with a compact source[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2013, 110(48): 19268-19272.
- [90] WEN H, MIAO H, BENNETT E E, et al. Flexible retrospective phase stepping in x-ray scatter correction and phase contrast imaging using structured illumination[J]. Plos One, 2013, 8(10): e78276.
- [91] HARMON K J, MIAO H, GOMELLA A A, et al. Motionless electromagnetic phase stepping versus mechanical phase stepping in x-ray phase-contrast imaging with a compact source[J]. Physics in Medicine & Biology, 2015, 60(8): 3031.
- [92] BÉRUJON S, WANG H, ZIEGLER E, et al. Shearing interferometer spatial resolution for at-wavelength hard x-ray metrology[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1466. American Institute of Physics, 2012: 217-222.
- [93] 张俊生, 王明泉, 郭永亮, 等. 影响 X 射线数字成像系统分辨率的因素分析[J]. CT 理论与应用研究, 2011, 20(2): 227-234.
- [94] KÖRDEL M, DEHLINGER A, SEIM C, et al. Laboratory water-window x-ray microscopy [J]. Optica, 2020, 7(6): 658-674.
- [95] HAWKES P W, SPENCE J C. Springer handbook of microscopy[M]. Springer Nature, 2019.
- [96] FOGELQVIST E, KÖRDEL M, CARANNANTE V, et al. Laboratory cryo x-ray microscopy for 3d cell imaging[J]. Scientific reports, 2017, 7(1): 13433.
- [97] SUN Y, WANG Y. Monitoring of galvanic replacement reaction between silver nanowires and hauc14 by in situ transmission x-ray microscopy[J]. Nano letters, 2011, 11(10): 4386-4392.
- [98] GUTTMANN P, BITTENCOURT C, REHBEIN S, et al. Nanoscale spectroscopy with polarized x-rays by nexafs-txm[J]. Nature Photonics, 2012, 6(1): 25-29.
- [99] CHAO W, KIM J, REKAWA S, et al. Demonstration of 12 nm resolution fresnel zone plate lens based soft x-ray microscopy[J]. Optics Express, 2009, 17(20): 17669-17677.
- [100] MOHACSI I, VARTIAINEN I, RÖSNER B, et al. Interlaced zone plate optics for hard x-ray imaging in the 10 nm range[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 43624.
- [101] SHAPIRO D A, YU Y S, TYLISZCZAK T, et al. Chemical composition mapping with nanometre resolution by soft x-ray microscopy[J]. Nature Photonics, 2014, 8(10): 765-769.
- [102] ZEISS. Zeiss xradia ultra nanoscale x-ray imaging: Explore at the speed of science[EB/OL]. 2023. <https://www.zeiss.com/content/dam/Microscopy/us/download/pdf/Products/X-Ray/product-810-ultra.pdf>.
- [103] QIAN G, MONACO F, MENG D, et al. The role of structural defects in commercial lithium-ion batteries[J]. Cell Reports Physical Science, 2021, 2(9).

- [104] VILA-COMAMALA J, WOJCIK M, DIAZ A, et al. Angular spectrum simulation of x-ray focusing by fresnel zone plates[J]. Journal of synchrotron radiation, 2013, 20(3): 397-404.
- [105] ATTWOOD D. Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications[M]. Cambridge university press, 2000.
- [106] MOHACSI I, VARTAINEN I, GUIZAR-SICAIROS M, et al. High resolution double-sided diffractive optics for hard x-ray microscopy[J]. Optics Express, 2015, 23(2): 776-786.
- [107] VILA-COMAMALA J, PAN Y, LOMBARDO J, et al. Zone-doubled fresnel zone plates for high-resolution hard x-ray full-field transmission microscopy[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2012, 19(5): 705-709.
- [108] GUZENKO V, ROMIJN J, VILA-COMAMALA J, et al. Efficient e-beam lithography exposure strategies for diffractive x-ray optics[C]//AIP Conference Proceedings: volume 1365. American Institute of Physics, 2011: 92-95.
- [109] KIRZ J. Phase zone plates for x rays and the extreme uv[J]. JOSA, 1974, 64(3): 301-309.
- [110] HENKE B, GULLIKSON E, DAVIS J. X-ray interactions: Photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at  $e = 50\text{-}30,000 \text{ ev}$ ,  $z = 1\text{-}92$ [J/OL]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1993, 54(2): 181-342. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X83710132>. DOI: <https://doi.org/10.1006/adnd.1993.1013>.
- [111] HOWELLS M R, BEETZ T, CHAPMAN H N, et al. An assessment of the resolution limitation due to radiation-damage in x-ray diffraction microscopy[J]. Journal of electron spectroscopy and related phenomena, 2009, 170(1-3): 4-12.
- [112] SNIGIREV A, KOHN V, SNIGIREVA I, et al. A compound refractive lens for focusing high-energy x-rays[J]. Nature, 1996, 384(6604): 49-51.
- [113] HEIMANN P, MACDONALD M, NAGLER B, et al. Compound refractive lenses as prefocusing optics for x-ray fel radiation[J]. Journal of synchrotron radiation, 2016, 23(2): 425-429.
- [114] LAST A, GUTEKUNST J, OPOLKA A, et al. Liquid compound refractive x-ray lens[J]. Optics Express, 2020, 28(15): 22144-22150.
- [115] MOHACSI I, KARVINEN P, VARTAINEN I, et al. High-efficiency zone-plate optics for multi-kev x-ray focusing[J]. Journal of synchrotron radiation, 2014, 21(3): 497-501.
- [116] WANG Y, YUN W, JACOBSEN C. Achromatic fresnel optics for wideband extreme-ultraviolet and x-ray imaging[J]. Nature, 2003, 424(6944): 50-53.
- [117] CHAPMAN H, BAJT S. High-resolution achromatic x-ray optical systems for broad-band imaging and for focusing attosecond pulses[J]. Proceedings of the Royal Society A, 2021, 477(2251): 20210334.
- [118] SANLI U T, RODGERS G, ZDORA M C, et al. Apochromatic x-ray focusing[J]. Light:

- Science & Applications, 2023, 12(1): 107.
- [119] KUBEC A, ZDORA M C, SANLI U T, et al. An achromatic x-ray lens[J]. Nature Communications, 2022, 13(1): 1305.
- [120] GE X, WANG Z, GAO K, et al. Effects of the condenser fractal zone plate in a transmission x-ray microscope[J]. Radiation Physics and Chemistry, 2014, 95: 424-427.
- [121] STOLLBERG H, YULIN S, TAKMAN P, et al. High-reflectivity cr/ sc multilayer condenser for compact soft x-ray microscopy[J]. Review of scientific instruments, 2006, 77(12).
- [122] RAU C, CRECEA V, RICHTER C P, et al. Imaging of micro-and nano-structures with hard x-rays[J]. Micro & Nano Letters, 2007, 2(1): 1-5.
- [123] ZENG X, DUEWER F, FESER M, et al. Ellipsoidal and parabolic glass capillaries as condensers for x-ray microscopes[J]. Applied optics, 2008, 47(13): 2376-2381.
- [124] JIANG B, LIU Z, SUN X, et al. Single bounce ellipsoidal glass monocapillary condenser for x-ray nano-imaging[J]. Optics Communications, 2017, 398: 91-94.
- [125] WANG Y, REN Y, SUN T, et al. Single-bounce ellipsoidal capillary for x-ray microscopes: Design and measurements[J]. Microscopy and Microanalysis, 2018, 24(S2): 282-283.
- [126] TAKANO A, MAEHATA K, IYOMOTO N, et al. Simulation model of transmitted x-rays in polycapillary optics for tes microcalorimeter eds system on scanning transmission electron microscope[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2017, 65(2): 758-765.
- [127] ZERNIKE F. Phase contrast, a new method for the microscopic observation of transparent objects part ii[J]. Physica, 1942, 9(10): 974-986.
- [128] SUN X, SHAO S, LI H, et al. A procedure for the characterization of monocapillary x-ray lenses as condensers for full-field transmission x-ray microscopes[J]. Frontiers in Physics, 2022, 10: 821549.
- [129] PAN K, LI Y, ZHANG S, et al. Study on the x-ray transmission characteristics of monolithic poly-capillary quasi-parallel lens composed with different diameter tubes[J]. Optics Communications, 2019, 439: 295-303.
- [130] BENK M, BERGMANN K, SCHÄFER D, et al. Compact soft x-ray microscope using a gas-discharge light source[J]. Optics letters, 2008, 33(20): 2359-2361.
- [131] CARLSON D B, GELB J, PALSHIN V, et al. Laboratory-based cryogenic soft x-ray tomography with correlative cryo-light and electron microscopy[J]. Microscopy and Microanalysis, 2013, 19(1): 22-29.
- [132] MÜLLER M, MEY T, NIEMEYER J, et al. Table-top soft x-ray microscope using laser-induced plasma from a pulsed gas jet[J]. Optics express, 2014, 22(19): 23489-23495.
- [133] KIM K W, KWON Y, NAM K Y, et al. Compact soft x-ray transmission microscopy with sub-50 nm spatial resolution[J]. Physics in Medicine & Biology, 2006, 51(6): N99.

## 参 考 文 献

---

- [134] WACHULAK P, TORRISI A, NAWAZ M F, et al. A compact “water window” microscope with 60 nm spatial resolution for applications in biology and nanotechnology[J]. *Microscopy and Microanalysis*, 2015, 21(5): 1214-1223.
- [135] 蒋晖, 李爱国, 等. X 射线衍射极限纳米聚焦的前沿进展[J]. *Acta Optica Sinica*, 2022, 42(11): 1134004.
- [136] 李明, 吴介立, 吴永前, 等. X 射线反射镜研制技术的现状和发展[J]. *光电工程*, 2020, 47(8): 200205-1.
- [137] MIMURA H, TAKEI Y, KUME T, et al. Fabrication of a precise ellipsoidal mirror for soft x-ray nanofocusing[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2018, 89(9).
- [138] MOTOYAMA H, IWASAKI A, TAKEI Y, et al. Broadband nano-focusing of high-order harmonics in soft x-ray region with ellipsoidal mirror[J]. *Applied Physics Letters*, 2019, 114(24).
- [139] KUME T, TAKEI Y, EGAWA S, et al. Development of electroforming process for soft x-ray ellipsoidal mirror[J]. *Review of scientific instruments*, 2019, 90(2).
- [140] MOTOYAMA H, SAITO T, MIMURA H. Error analysis of ellipsoidal mirrors for soft x-ray focusing by wave-optical simulation[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2014, 53(2): 022503.
- [141] YUMOTO H, KOYAMA T, MATSUYAMA S, et al. Ellipsoidal mirror for two-dimensional 100-nm focusing in hard x-ray region[J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 16408.
- [142] 田金萍. X 射线成像旋转椭球聚焦镜的设计与检测[D]. 中国科学技术大学, 2009.
- [143] HILI K, FAN D, GUZENKO V A, et al. Nickel electroplating for high-resolution nanostructures[J]. *Microelectronic Engineering*, 2015, 141: 122-128.
- [144] 孙浩. 基于微电铸 overplating 的微透镜制造技术研究[D]. 中国科学技术大学, 2016.
- [145] SHAO S, LI H, YUAN T, et al. Detailed simulation of single-bounce capillaries for various x-ray sources[J]. *Frontiers in Physics*, 2022, 10: 816981.
- [146] ZHANG S, PAN K, WANG Z, et al. Simulation of optical properties of ellipsoidal monocapillary x-ray optics with inner-surface imperfections[J]. *Optics Communications*, 2021, 493: 127028.
- [147] LIU A, LIN Y. Simulation of x-ray transmission in capillaries with different profiles[J]. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2004, 66(6): 577-584.
- [148] BENK M P. Pinchplasma für die mikroskopie mit weicher röntgenstrahlung[M]. Shaker, 2011.
- [149] PFEIFFER F. X-ray ptychography[J]. *Nature Photonics*, 2018, 12(1): 9-17.
- [150] HOLLER M, GUIZAR-SICAIROS M, TSAI E H, et al. High-resolution non-destructive three-dimensional imaging of integrated circuits[J]. *Nature*, 2017, 543(7645): 402-406.

## 参 考 文 献

---

- [151] ZANETTE I, ZHOU T, BURVALL A, et al. Speckle-based x-ray phase-contrast and dark-field imaging with a laboratory source[J]. Physical review letters, 2014, 112(25): 253903.

## 致 谢

在漫长的求学路程中，从 2002 年至 2023 年，时光如白驹过隙，历经 21 载的磨砺与成长。本论文是我从 20018 年 9 月至 2022 年 9 月在中国科学技术大学精密机械与精密仪器系以及 2022 年 10 月至 2023 年 9 月在瑞士 PSI 硕博连读期间所作研究工作的总结。

我要向导师王克逸教授深深致谢，您的治学严谨和深厚学术造诣一直是我学术道路上的明灯。与您一起的日子让我受益匪浅，从共同设计电路图纸、加工机械结构、组装白光干涉仪、去台州淘宝、再到调节 X 射线光路，每一步都充满了师生间的真挚合作和学术启发。您不仅是我的导师，更是我的良师益友。您的悉心指导、学术自由的培养，以及对我探索研究方向的信任，都是我学术成长中的重要支撑。感谢您提供的实验材料、设备和经费，让我能够充分发挥创造力，探索科学的未知领域。

我也要衷心感谢瑞士保罗谢尔研究所（Paul Scherrer Institut）的 Christian David，您对我的悉心指导和课题组经验的无私分享，让我在国外学术环境中得以快速适应和成长。您的耐心解答和精心的实验指导，使我能够在新的领域中掌握关键技术。你最常说“Step by step”，虽然这句话经常被同学们拿来调侃，但每次这句话也让我每次实验失败时重拾信心。

感谢中国科大光电信息技术实验室的师兄师姐和师弟师妹，是我学术道路上的伙伴和知己。特别感谢程光宇和王玉山师兄，我们一同搭建实验平台，从最初的设计到最后的成果，每一步都是我们共同的努力和汗水。感谢同级的沈远，在实验电路和图像处理算法上的指导让我受益匪浅。感谢秦东旭师弟，与你一起做实验、讨论问题和申请项目让我学习到很多，以及感谢我不在国内期间，你对我所有工作事务的支持与帮助。还要感谢简慧杰、王玉伟、李飞、蔡柏林、王梦宇、吴家俊、陈强、朱其淘、王静、王彦，杨煜，同级的孟令俊，刘慧婷、陈天赐、陈鹏、黄子文、于凯洋、康朝烽、张军、吴迪、杨彬彬、唐荻等师弟师妹，以及杨明春、胡涛、方竑基、黎雄威等朋友，与你们的交流与陪伴使我的学术旅程更加丰富多彩。感谢中国科大国家同步辐射实验室的王秋平、刘正坤、吴朝、申锦、张伟泉、韦怀坤等对我在 X 射线探测器，LTP 测量与实验方法上的帮助。感谢中国科学院高能物理研究所李明、张常睿为我提供 LTP 测量帮助与面形测量方法的有益探讨。

感谢 PSI 的 LMN 大课题组的同事们，Joan Vila Comamala, Umut Tunca Sanli, Talgat Mamyrbayev, Nazanin Samadi, Mano Raj Dhanalakshmi Veeraraj, Dario Theodor Marty, Vitaliy Guzenko, Anja Weber, Eugen Deckardt, Lavazza Alessandra，你们

## 致 谢

---

的合作和交流让我的研究充满活力。感谢同组的齐鹏和曲笛对我在瑞士生活的帮助，以及对我实验的指导。

我要由衷地感谢我亲爱的父母，始终以无微不至的关爱和培养引导我走向今天。是您们的辛勤付出和无私支持，让我能够拥有优越的学习条件。

感谢所有走进我生命的人们，是你们的陪伴和支持，成就了我求学路上的点点滴滴。未来，我将继续努力，为科学事业献出更多的心血和汗水。

2023 年 8 月于瑞士

## 在读期间发表的学术论文与取得的研究成果

### 已发表论文

1. **Shuai Zhao**, Yu Yang, Huiting Liu, et al. "X-ray wavefront sensing and optics metrology using a microfocus x-ray grating interferometer with electromagnetic phase stepping", **Appl. Phys. Lett.** 120, 181105 (2022).
2. **Shuai Zhao**, Yu Yang, Yuan Shen, et al. "Optics metrology and at-wavelength wavefront characterization by a microfocus X-ray grating interferometer," **Opt. Express** 29, 22704-22713 (2021).
3. **Shuai Zhao**, Qiuping Wang, Lei Zhang, et al. Wavefront Sensing and Surface Shape Measurement Based on Microfocus X-Ray Grating Interferometer[J]. **Acta Optica Sinica**, 2022, 42(23): 2334002(in chinese)  
赵帅, 王秋平, 张磊, 王克逸. 基于微焦点 X 射线光栅干涉仪的波前传感与面形测量技术 [J]. 光学学报, 2022, 42(23): 2334002.
4. **Shuai Zhao**, Ke-yi Wang, Guang-yu Cheng, et al. "X-ray wavefront characterization with grating interferometry using an x-ray microfocus laboratory source", **Proc. SPIE 11492**, Advances in Metrology for X-Ray and EUV Optics IX, 114920Q (25 August 2020)

### 完成项目

1. 参与科技部国家重点研发计划子课题：高分辨率 X 射线在线检测
2. 参与国家同步辐射实验室联合基金：X 射线旋转椭球聚焦镜加工工艺研究
3. 参与国家同步辐射实验室联合基金：光栅干涉法实现二维高精度 X 射线波前表征
4. 参与瑞士纳米科学基金：消色差 X 射线显微镜
5. 主持中央高校基本科研业务费（中国科大“双创基金”）
6. 主持中国科学技术大学学生创新创业和成果转化行动计划‘学生创新创业基金’资助项目（中国科大“雏鹰基金”）

### 获得奖励

1. 2023 年第五届瑞士创新创业大赛第一名
2. 中国科大光华奖学金