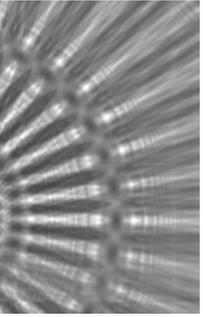


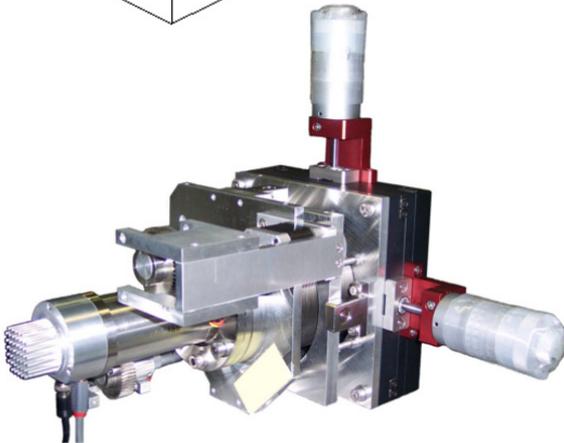
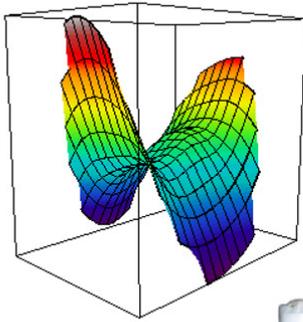


Göttingen Series in
X-ray Physics



Bernhard Flöter

Strahlcharakterisierung von Freie-Elektronen-Lasern im weichen Röntgen-Spektralbereich



Universitätsverlag Göttingen

Bernhard Flöter
Strahlcharakterisierung von Freie-Elektronen-Lasern
im weichen Röntgen-Spektralbereich

This work is licensed under the [Creative Commons](#) License 3.0 “by-nd”, allowing you to download, distribute and print the document in a few copies for private or educational use, given that the document stays unchanged and the creator is mentioned. You are not allowed to sell copies of the free version.



erschienen als Band 8 in der Reihe „Göttingen series in x-ray physics“
im Universitätsverlag Göttingen 2012

Bernhard Flöter

Strahlcharakterisierung von
Freie-Elektronen-Lasern
im weichen
Röntgen-Spektralbereich

Göttingen series in x-ray physics
Band 8



Universitätsverlag Göttingen
2012

Bibliographische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliographie; detaillierte bibliographische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Diese Arbeit wurde vom Deutschen Elektronen-Synchrotron finanziert und von der DFG im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 755 „Nanoscale Photonic Imaging“ unterstützt.

Anschrift des Autors

Dr. Bernhard Flöter

e-mail: bernhard.floeter@web.de

Dissertation zur Erlangung des
mathematisch-naturwissenschaftlichen Doktorgrades
„Doctor rerum naturalium“
der Georg-August-Universität Göttingen
vorgelegt von Bernhard Flöter aus Darmstadt

Referent: Prof. Dr. Tim Salditt

Korreferent: Prof. Dr. Gerd Marowsky

Tag der mündlichen Prüfung: 06.12.2011

Dieses Buch ist auch als freie Onlineversion über die Homepage des Verlags sowie über den OPAC der Niedersächsischen Staats- und Universitätsbibliothek (<http://www.sub.uni-goettingen.de>) erreichbar und darf gelesen, heruntergeladen sowie als Privatkopie ausgedruckt werden. Es gelten die Lizenzbestimmungen der Onlineversion. Es ist nicht gestattet, Kopien oder gedruckte Fassungen der freien Onlineversion zu veräußern.

Satz und Layout: Bernhard Flöter

Umschlaggestaltung: Jutta Pabst

Titelabbildung: Bernhard Flöter

© 2012 Universitätsverlag Göttingen

<http://univerlag.uni-goettingen.de>

ISBN: 978-3-86395-074-3

ISSN: 2191-9860

Preface of the series editor

The Göttingen series in x-ray physics is intended as a collection of research monographs in x-ray science, carried out at the Institute for X-ray Physics at the Georg-August-Universität in Göttingen, and in the framework of its related research networks and collaborations.

It covers topics ranging from x-ray microscopy, nano-focusing, wave propagation, image reconstruction, tomography, short x-ray pulses to applications of nanoscale x-ray imaging and biomolecular structure analysis.

In most but not all cases, the contributions are based on Ph.D. dissertations. The individual monographs should be enhanced by putting them in the context of related work, often based on a common long term research strategy, and funded by the same research networks. We hope that the series will also help to enhance the visibility of the research carried out here and help others in the field to advance similar projects.

Prof. Dr. Tim Salditt, Editor
Göttingen February 2011

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die Wellenfront eines Strahls bei voller und partieller Kohärenz	3
1.1 Die Wellenfront in der paraxialen Optik	3
1.2 Die Wellenfront eines vollkohärenten Strahls	4
1.2.1 Die geometrische Wellenfront	4
1.2.2 Die Wellenfront in der Wellenoptik	5
1.3 Die Wellenfront eines partiell kohärenten Strahls	6
1.3.1 Kohärenztheorie 2. Ordnung für skalare Felder	6
1.3.2 Die Wignerfunktion für partiell kohärentes Licht	7
1.3.3 Bestimmung der Wellenfront aus der Wignerfunktion	8
2 Die Propagation von Strahlen durch optische Systeme	11
2.1 Propagation der Kohärenzfunktion und das Gauß-Schell-Modell	11
2.1.1 Propagation der komplexen Amplitude	11
2.1.2 Propagation der Kohärenzfunktion	14
2.1.3 Das Gauß-Schell-Modell	15
2.2 Strahlcharakterisierung nach der Methode der zweiten Momente	16
2.2.1 Matrizenoptik und ABCD-Systeme	16
2.2.2 Propagation der Wignerfunktion und ihrer Momente durch ABCD-Systeme	17
2.2.3 Bestimmung der Strahlparameter nach ISO-Norm 11146	19
2.3 Aberrationen optischer Systeme	20
2.3.1 Geometrisch-optische Einführung in die Theorie der Aberrationen	21
2.3.2 Wellenoptische Betrachtung der Aberrationen	23
2.3.3 Polynomialentwicklung der Wellenfront	24
3 Freie-Elektronen-Laser im Röntgen-Spektralbereich	29
3.1 EUV und weiche Röntgenstrahlung	29
3.1.1 Einordnung in das elektromagnetische Spektrum	29
3.1.2 Spiegeloptiken	30
3.1.3 Wellenfrontmessung im EUV- und Röntgen-Spektralbereich	31
3.2 Undulatorstrahlung	32
3.3 Freie-Elektronen-Laser	34
3.3.1 Grundlagen der Strahlungserzeugung in FEL	35
3.3.2 High-Gain SASE FEL	36
3.4 Der Freie-Elektronen-Laser in Hamburg	39
4 Aufbau und Funktionsweise der Hartmann-Sensoren	43
4.1 Hartmann- und Hartmann-Shack-Verfahren zur Wellenfrontbestimmung	43
4.2 Konstruktion der Hartmann-Sensoren	44
4.3 Berechnung der Strahlparameter	48
4.3.1 Zweite Momente aus den Messdaten des Hartmann-Sensors	48
4.3.2 Globale Strahlparameter	49

4.4	Einfluss der transversalen Kohärenz	50
5	Wellenfrontmessungen an FLASH Beamlines	53
5.1	Experimenteller Aufbau und Vorbereitung des Sensors	53
5.1.1	Experimenteller Aufbau	53
5.1.2	Kalibrierung des Sensors	54
5.1.3	Ausrichtung des Sensors	56
5.1.4	Abschwächung des Strahls	58
5.1.5	Vergleich des ersten und des zweiten Sensors	59
5.1.6	Abschätzung des Kohärenzeinflusses	62
5.2	Messung ohne Fokussierspiegel	62
5.3	Spiegeljustage und Strahlparameter mit fokussierender Optik	66
5.3.1	Beamline BL2 November 2010	66
5.3.2	Beamline BL2 Juni 2009	69
5.3.3	Beamline BL1 März 2009	70
6	Strahlparameterbestimmung aus Strahlprofilen	73
6.1	Experimenteller Aufbau	73
6.2	Bestimmung der Strahlparameter nach ISO 11146	74
6.2.1	EUV-Kamera	74
6.2.2	PMMA	75
6.2.3	Vergleich der Messverfahren	77
6.3	Rekonstruktion der Wignerfunktion aus Strahlprofilen	80
6.3.1	Numerische Rekonstruktion	80
6.3.2	Ergebnisse der Rekonstruktion	82
6.3.3	Diskussion und Vergleich der Messwerte	83
7	Strahlcharakterisierung an LCLS	87
7.1	Experimenteller Aufbau	87
7.2	Intensitätsprofil und Stabilität des Strahls	87
7.3	Bestimmung der Wellenfront	88
7.4	Detektor und Kalibrierung	90
8	Untersuchung photothermischer Verformungen bei 15keV	91
8.1	Hintergrund: Thermische Verformung von Röntgenoptiken	91
8.2	Experimenteller Aufbau und Durchführung	92
8.2.1	Experimenteller Aufbau	92
8.2.2	Durchführung	92
8.3	Messung der Oberflächendeformation	94
8.3.1	Rekonstruktion der Oberfläche aus der Wellenfront	94
8.3.2	Messergebnisse	96
8.4	Vergleich mit FEM Simulationen	98
8.5	Diskussion und Vergleich der Ergebnisse	99
9	Zusammenfassung und Ausblick	101

A Anhang	105
A.1 Liste verwendeter Definitionen, Abkürzungen und Symbole	105
A.2 Zernikepolynome	108
A.3 SASE FEL Eigenschaften	109
Literatur	110
Publikationsliste	121
Danksagung	123
Lebenslauf	125

Einleitung

In den letzten Jahren haben mit dem Freie-Elektronen-Laser in Hamburg (FLASH) am Deutschen Elektronen-Synchrotron [1, 2] und der Linac Coherent Light Source am SLAC National Accelerator Laboratory in Kalifornien [3] große Freie-Elektronen-Laser (FEL) den Nutzerbetrieb aufgenommen, die weiche bzw. harte Röntgen-Strahlung erzeugen. Außerdem sind SACLA in Japan [4] im Bereich harter Röntgenstrahlung und die Freien-Elektronen-Laser SCSS [5] (ebenfalls Japan) und Fermi@Elettra in Italien [6] im Extrem Ultravioletten Spektralbereich (EUV) in Betrieb. FLASH und LCLS basieren auf dem Self Amplified Spontaneous Emission (SASE)-Prinzip, bei dem die spontane Undulatorstrahlung eines relativistischen Elektronenpakets, wie sie auch an Synchrotroneinrichtungen produziert wird, durch Wechselwirkung mit diesem verstärkt wird. Zentrale Eigenschaften der FEL-Strahlung sind die gegenüber einfacher Undulatorstrahlung etwa zehn Größenordnungen höhere Spitzenbrillanz von bis zu 10^{33} Photonen/(s mm^2mrad^2) in 0.1% spektraler Bandbreite, die kurze Pulsdauer im Bereich von 10-100 Femtosekunden und der hohe Grad transversaler Kohärenz bei zugleich schmalbandigem Frequenzspektrum. Aufgrund dieser Eigenschaften ist die erzeugte Strahlung ein geeignetes Mittel zur Untersuchung von Materie auf der Nanometer- und Femtosekundenskala mit vielfältigen Anwendungen in Physik, Chemie und Biologie. Bekannte Beispiele hierfür sind die kohärente und linsenlose Röntgenmikroskopie mit einzelnen Femtosekunden-Pulsen, basierend auf iterativ-numerischer [7] oder holografischer Objektrekonstruktion [8], die am FLASH erfolgreich demonstriert wurden. Atome und Cluster können bei Energiedichten, die im Röntgenbereich bisher unerreichbar waren, untersucht werden [9]. Einen Überblick über die Experimente aus den ersten drei Jahren des FLASH-Nutzerbetriebs gibt der Review-Artikel [10].

Eine möglichst vollständige Charakterisierung der Strahlung soll helfen, die besonderen Eigenschaften der FEL-Strahlung gezielt zu nutzen. Dies umfasst spektrale Eigenschaften, transversale Kohärenz, Wellenfront und natürlich Intensität und Pulslänge. Zusammen bestimmen diese Parameter die Propagation der Strahlung. Das Design einer Beamline sollte gewährleisten, dass der Strahl ohne großen Verlust an Strahlqualität, ausgedrückt durch die Beugungsmaßzahl M^2 , vom Undulator zu den Experimentierplätzen transportiert wird [11]. Eine zentrale Größe ist dabei die Rauigkeit der Wellenfront, die wesentlich die Fokussierbarkeit des Strahls bestimmt und viele Experimente, beispielsweise der kohärenten Röntgenmikroskopie, stören kann.

Eine etablierte Technik zur Bestimmung der Wellenfront kohärenter und partiell kohärenter Strahlen über einen großen Spektralbereich vom Infraroten bis zur Röntgenstrahlung ist der Hartmann-Test [12]. Dabei wird die Wellenfront durch eine Aperturmaske aufgeteilt und das Intensitätsmuster auf einem Schirm dahinter bestimmt. Aus den Abweichungen der Intensitätsschwerpunkte relativ zu den Positionen für eine bekannte Referenzwellenfront wird der Wellenfrontgradient in der Maskenebene berechnet. Die bis heute bedeutendste Verbesserung des Hartmann-Tests ist die Verwendung von Mikrolinsenarrays anstelle einfacher Aperturen [13]. In Verbindung mit CMOS- oder CCD-Detektoren zur Auswertung des Intensitätsmusters spricht man von Hartmann-Shack-Sensoren. Sie finden heute vielfältige Anwendung, z. B. zur Strahl-

Charakterisierung von Lasern, zur Prüfung optischer Elemente und Oberflächen, in der Ophthalmologie und zur Regelung adaptiver Optiken in der Astronomie.

Das Standardverfahren der Charakterisierung einfach-astigmatischer Strahlen ist nach ISO 11146 [14] die Messung mehrerer Strahlprofile um die Strahltaile entlang der optischen Achse. Es können im Grundsatz die gleichen Strahlpropagationsparameter wie mit dem Hartmann-Sensor bestimmt werden, wobei dieser im Gegensatz zur Messung nach ISO 11146 einzelne Pulse auflösen und allgemein-astigmatische Strahlen charakterisieren kann. Die Strahlprofile enthalten hingegen auf natürliche Weise die Einflüsse der partiellen Kohärenz auf das Propagationsverhalten. Diese geht in die Strahlparameter ein und kann explizit durch Rekonstruktion der Wignerfunktion bestimmt werden.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden zwei Wellenfrontsensoren für den Einsatz an FLASH aufgebaut und dort sowie an LCLS verwendet. Mit den Sensoren wurden die Strahlpropagationsparameter der Beamlines bestimmt und die Fokussierspiegel justiert [15, 16]. Trotz fehlerarmer und gut justierter Optiken kann der Wärmeeintrag in die Spiegel zur Herausbildung transienter Aberrationen der Wellenfront führen. Es wurde ein Verfahren zur zeitaufgelösten Messung der thermischen Verformungen entwickelt und an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) an einer Silizium-Probe demonstriert [17].

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt aufgebaut: In den Kapiteln 1, 2 werden die für das Verständnis des Messprinzips und der Messergebnisse zentralen Begriffe der Strahlcharakterisierung eingeführt. Auf die Erzeugung der FEL-Strahlung im Extrem Ultravioletten Spektralbereich und die Charakteristika der Strahlung wird in Kapitel 3 eingegangen. Es folgt eine Beschreibung des Hartmann-Messprinzips und der beiden im Rahmen dieser Arbeit konstruierten Hartmann-Sensoren in Kapitel 4. In den darauffolgenden Kapiteln werden die durchgeführten Experimente beschrieben. In Kapitel 5 wird dargestellt, wie der Hartmann-Wellenfrontsensor an den FLASH-Beamlines zur Bestimmung der Strahlparameter und zur Optikjustage eingesetzt wurde. Die Parameter werden mit jenen aus Strahlprofilmessungen und der Rekonstruktion der Wignerfunktion aus Kapitel 6 verglichen. Danach wird in Kapitel 7 der Einsatz des Wellenfrontsensors an der AMO End-Station der Linac Coherent Light Source beschrieben. Im vorletzten Kapitel 8 wird ein im Rahmen dieser Arbeit entwickeltes Verfahren zur Messung transienter thermischer Verformungen beschrieben und es werden erste Ergebnisse präsentiert. Schließlich werden die wichtigsten Resultate in Kapitel 9 zusammengefasst und ein kleiner Ausblick gibt Anknüpfungspunkte für zukünftige Arbeiten zur Strahlcharakterisierung im EUV- und weichen Röntgen-Spektralbereich.

1 Die Wellenfront eines Strahls bei voller und partieller Kohärenz

Die Wellenfront beschreibt den lokalen Energietransport des elektromagnetischen Feldes. Sie ist eine zentrale Größe der Strahl- und Optikcharakterisierung, weil sie großen Einfluss auf die Propagationseigenschaften eines Strahls hat und dabei Information über die optischen Elemente trägt, die der Strahl passiert hat.

Klassische elektromagnetische Felder werden durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben [18]. Die Lösung der Gleichungen mit allen Randbedingungen ist im Allgemeinen nicht in geschlossener Form möglich und kann numerisch aufwendig sein. Daher werden in der Optik zumeist diverse Näherungsverfahren verwendet. Der Strahl wird in dieser Arbeit skalar, quasi-monochromatisch und paraxial beschrieben, unter Berücksichtigung der partiellen Kohärenz. Im folgenden Kapitel werden diese Begriffe kurz erläutert und dabei die Wellenfront eingeführt. Alle Formeln werden in SI-Einheiten angegeben.

1.1 Die Wellenfront in der paraxialen Optik

Es werden die Felder in einem linearen, isotropen Medium ($\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}$) mit Brechungsindex $n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ betrachtet. Aus den Maxwellgleichungen folgt, dass die \mathbf{E} und \mathbf{H} -Felder in Abwesenheit freier Ladungen und Ströme, wenn das Medium zudem homogen ($\nabla \epsilon_r = \nabla \mu_r = 0$) und stationär ($\partial_t \mu_r = \partial_t \epsilon_r = 0$) ist, die *Wellengleichung* $\Delta \mathbf{E} - (n/c)^2 \partial_t^2 \mathbf{E} = 0$ erfüllen (\mathbf{H} analog) mit dem Laplace-Operator Δ und der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum $c^{-1} = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$. Für ein monochromatisches Feld mit

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{V}_0(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)] \quad (1.1)$$

wobei \mathbf{V} hier für die Felder \mathbf{E}, \mathbf{H} steht, folgt die homogene *Helmholtzgleichung*

$$(\Delta + k) \mathbf{V}_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.2)$$

mit dem Wellenvektor im Medium $k = n\omega/c$. Ist die Divergenz des Strahls nicht zu groß, z. B. hinter den meist niederaperturigen Beamline-Optiken, kann die Helmholtzgleichung durch die SVE („Slowly Varying Envelope“)-Näherung auf die *paraxiale Wellengleichung* reduziert werden. Dazu wird der Strahl in eine in Ausbreitungsrichtung z schnell oszillierende Phase und eine langsam veränderliche Enveloppe zerlegt, $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \mathbf{U}(\mathbf{r}) \exp[i(kz - \omega t)]$ mit $|\partial_z^2 \mathbf{U}| \ll |2k \partial_z \mathbf{U}|$. Hier und im Folgenden sollen x, y, z die Koordinaten eines rechtshändigen Koordinatensystems sein, wobei die z -Achse als *optische Achse* bezeichnet wird, die xz -Ebene als *Meridionalebene* und die yz -Ebene als *Sagittalebene*. Es folgt

$$\Delta_{\perp} \mathbf{U}(\mathbf{r}) + 2ik \partial_z \mathbf{U}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.3)$$

mit dem transversalen Laplaceoperator $\Delta_{\perp} = \partial_x^2 + \partial_y^2$.

Die Wellenfront $w(x, y; z_m)$ eines paraxialen Feldes in einer Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung bei z_m ist nach ISO 15367 [19] definiert als die stetige Fläche, die den Ausdruck

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy I(x, y; z_m) |\hat{\mathbf{S}}_{\perp}(x, y; z_m) - \nabla_{\perp} w(x, y; z_m)|^2 \quad (1.4)$$

mit dem Intensitäts-normierten, transversalen Poynting-Vektor $\hat{\mathbf{S}}_{\perp} = \mathbf{S}_{\perp}/I$ minimiert. Der Poynting-Vektor ist gegeben durch $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ und wird mit Richtung und Betrag des Energieflusses des elektromagnetischen Feldes identifiziert [20]. Meist wird unter der Wellenfront die mittlere Wellenfront verstanden, die auf Basis des zeitgemittelten Poyntingvektors berechnet wird. Die Wellenfrontdefinition (1.4) kann in der Wellenoptik verwendet werden, ist aber auch konsistent mit dem Wellenfrontbegriff der geometrischen Optik.

1.2 Die Wellenfront eines vollkohärenten Strahls

1.2.1 Die geometrische Wellenfront

In der Strahlenoptik versteht man unter einer *geometrischen Wellenfront* eine zu allen Strahlen eines Strahlenbündels orthogonale Fläche. Diese Definition ist im Allgemeinen im Gegensatz zu (1.4) nicht auf paraxiale Strahlen beschränkt. Eine solche Fläche kann durch *Kurzwellenasymptotik* $k_0^{-1} \rightarrow 0$ wie folgt konstruiert werden. Der Ansatz $\mathbf{V}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{r}) \exp[ik_0 \mathcal{S}(\mathbf{r})]$ mit dem reellwertigen *Eikonale* $\mathcal{S}(\mathbf{r})$ und der komplexen Funktion $\mathbf{v}_0(\mathbf{r})$ liefert, eingesetzt in die Maxwell-Gleichungen für das monochromatische Feld, die bekannte *Eikonalgleichung* [20].

$$(\nabla \mathcal{S}(\mathbf{r}))^2 = n^2 \quad (1.5)$$

Für den zeitgemittelten Poynting-Vektor $\langle \mathbf{S} \rangle$ folgt dann [20]

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c}{n^2} \langle w_{em} \rangle \nabla \mathcal{S} = \langle I \rangle \frac{\nabla \mathcal{S}}{n} \quad (1.6)$$

mit der zeitgemittelten Energiedichte $\langle w_{em} \rangle$ des elektromagnetischen (EM) Feldes. Die Ausbreitungsrichtung hängt in der geometrischen Optik demnach ausschließlich von der Phase ab und jeder Strahl breitet sich in Richtung der größtmöglichen Zunahme des Eikonals aus. Da der Gradient generell senkrecht auf den Isoflächen eines skalaren Feldes steht, ist jede Isofläche des Eikonals eine geometrische Wellenfront. Angenommen, es existiert die Darstellung

$$W_{z_m} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3 : \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x \\ y \\ W_{z_m}(x, y) \end{pmatrix} \text{ mit } \mathcal{S}(x, y, W_{z_m}(x, y)) = \mathcal{S}_0 \quad (1.7)$$

wobei \mathcal{S}_0 eine Konstante ist und z_m ein Scharparameter, mit dem eine bestimmte Isofläche identifiziert wird. Mit (1.6) gilt für den normierten Poyntingvektor an einem Punkt auf der Isofläche

$$\hat{\mathbf{S}}(x, y, W_{z_m}(x, y)) = \frac{\partial_z \mathcal{S}}{n} \begin{pmatrix} -\nabla_{\perp} W_{z_m}(x, y) \\ 1 \end{pmatrix} = \partial_z \mathcal{S} \cdot \mathbf{n}_W \quad (1.8)$$

Der Normalenvektor \mathbf{n}_W an die geometrische Wellenfront zeigt die Richtung des Strahls an. Geometrisch-optisch wird (1.4) durch $\hat{\mathbf{S}}_{\perp}(x, y, z_m) = \nabla_{\perp} w(x, y, z_m)$ minimiert. Eine mögliche Lösung in homogenen Medien ist schlicht $w(x, y, z_m) = \mathcal{S}(x, y, z_m)/n$. Kann der Strahl paraxial genähert werden, so dass aus der Eikonalgleichung (1.5) $\partial_z \mathcal{S} = n$ folgt und der Poyntingvektor an einem Punkt der geometrischen Wellenfront mit dem in der Referenzebene z_m identifiziert werden kann, folgt aus Vergleich mit (1.8) $\nabla_{\perp} W_{z_m}(x, y) = -\nabla_{\perp} w(x, y; z_m)$ und man kann $W_{z_m}(x, y) = -w(x, y; z_m)$ wählen. Darstellungen der Wellenfront sind in dieser Arbeit immer so, dass der lokale Energietransport entlang des Normalenvektors der Wellenfront erfolgt.

1.2.2 Die Wellenfront in der Wellenoptik

Auch wellenoptisch ist der Wellenfrontgradient in homogenen Medien proportional zum Phasengradienten, wenn ein quasi-monochromatischer, paraxialer und linear polarisierter Strahl angenommen wird. Für Felder mit harmonischer Zeitabhängigkeit der Form (1.1) lautet der zeitgemittelte Poyntingvektor

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0) = \frac{i}{4\mu_0\omega} \mathbf{E}_0 \times (\nabla \times \mathbf{E}_0^*) + c.c. \quad (1.9)$$

Durch Einsetzen des Ansatzes $\mathbf{E}_0 = \mathbf{e}E(x, y, z) \exp(ikz)$ mit dem normierten Polarisationsvektor $\mathbf{e} = (|e_x| \exp(i\delta_x), |e_y| \exp(i\delta_y))$ und paraxiale Näherung $|\partial_z E_i| \ll |kE_i|$ sowie $E_z = i(\partial_x E_x + \partial_y E_y)/k$ (Quellenfreiheit) und schließlich $|e_x|^2 + |e_y|^2 = 1$, folgt nach Rechnung

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S} \rangle &= \frac{\epsilon_0 \epsilon_r c}{4nk} \left\{ i(E \nabla E^* - E^* \nabla E) + 2k|E|^2 \mathbf{e}_z + \right. \\ &\quad \left. 2 \sin(\delta) |e_x| |e_y| \left[\partial_r |E|^2 \mathbf{e}_\phi - \frac{1}{r} \partial_\phi |E|^2 \mathbf{e}_r \right] \right\} \quad (1.10) \end{aligned}$$

mit den Basisvektoren in Zylinderkoordinaten $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\phi, \mathbf{e}_z$ und $\delta = \delta_x - \delta_y$. Die z -Komponenten der Gradienten-Ausdrücke können im Rahmen der paraxialen Optik ebenfalls vernachlässigt werden und sind hier zur Vereinfachung der Darstellung belassen (siehe [21] für den rotationssymmetrischen Fall mit einer weitergehenden Diskussion der daraus resultierenden Impulsdichte des EM Feldes, [22] für eine detaillierte Rechnung). Der $\sin(\delta)$ -Term verschwindet für linear polarisiertes Licht und es folgt

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r c}{2nk} \{ \tilde{E}^2 \nabla \phi(x, y, z) + k \tilde{E}^2 \mathbf{e}_z \} \quad (1.11)$$

mit $E(x, y, z) = \tilde{E}(x, y, z) \exp[i\phi]$, wobei $\tilde{E}, \phi \in \mathbb{R}$. Die getroffenen Annahmen sind an den in dieser Arbeit untersuchten Freie-Elektronen-Lasern FLASH und LCLS gegeben, denn sie besitzen planare Undulatoren [23] und produzieren somit linear polarisierte Strahlung, die zudem über Beamline-Optiken mit kleiner numerischer Apertur zum Experiment transportiert wird. Zur Vereinfachung der Darstellung wird die skalare komplexe Amplitude eingeführt

$$u(x, y, z) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r c}{2n}} \tilde{E}(x, y, z) \exp[i\phi(x, y, z)] \quad (1.12)$$

mit der Dimension $\sqrt{\text{Energie}/(\text{Fläche} \cdot \text{Zeit})}$. Wie aus der Definition ersichtlich erfüllt $u(x, y, z)$ die paraxiale Wellengleichung (1.3) und ist nach (1.11) bereits durch eine Messung des transversalen Poyntingvektors und der Intensität $I(x, y; z)$ in einer z -Ebene senkrecht zur optischen Achse vollständig charakterisiert. Wie in Kapitel 4 näher beschrieben, bedeutet dies, dass ein vollkohärenter Strahl durch eine Hartmann-Messung im Prinzip vollständig charakterisiert ist. Zusammenfassend gilt

$$\langle \mathbf{S}_\perp \rangle = \frac{|u(x, y, z)|^2}{k} \nabla_\perp \phi(x, y, z) \quad (1.13)$$

$$\langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{e}_z = |u(x, y, z)|^2 \quad (1.14)$$

wobei nun die z -Komponente des Phasengradienten vernachlässigt wurde. Die Verwendung skalarer Amplituden kann auch über den hier beschriebenen Fall paraxialer, monochromatischer, linear polarisierter Strahlen in homogenen Medien ausgedehnt werden. Zur allgemeinen Konstruktion einer geeigneten skalaren Darstellung siehe die von H. S. Green und E. Wolf begonnene Reihe von Veröffentlichungen [24, 25, 26]. Vergleich mit der Wellenfrontdefinition (1.4) zeigt, dass der Wellenfrontgradient $\boldsymbol{\beta}(x, y; z)$ im betrachteten Fall proportional zum transversalen Phasengradienten ist.

$$\boldsymbol{\beta}(x, y; z) \equiv \nabla_\perp w(x, y; z) = \frac{\nabla_\perp \phi(x, y; z)}{k} \quad (1.15)$$

1.3 Die Wellenfront eines partiell kohärenten Strahls

1.3.1 Kohärenztheorie 2. Ordnung für skalare Felder

Elektromagnetische Felder, die statistischen räumlichen und zeitlichen Schwankungen unterworfen sind, lassen sich durch Korrelationsfunktionen beschreiben [27]. Das Feld an einem Raumzeitpunkt (\mathbf{r}, t) werde durch eine komplexe skalare Amplitude $V(\mathbf{r}, t)$ beschrieben, deren Betragsquadrat die Intensität $I(\mathbf{r}, t)$ liefert. Die Korrelationsfunktion zweiter Ordnung an den Raumzeitpunkten (\mathbf{r}_1, t_1) und (\mathbf{r}_2, t_2) , gemittelt über das statistische Ensemble ($\langle \cdot \rangle_e$), wird als *wechselseitige Kohärenzfunktion* (Mutual Coherence Function, MCF) $\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)$ bezeichnet [28]

$$\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2) = \langle V(\mathbf{r}_1, t_1) V^*(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle_e \quad (1.16)$$

Wie aus der Definition ersichtlich gilt $\Gamma(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}, t) = I(\mathbf{r}, t)$. Normiert auf die Wurzel der Intensität an den beiden Raumzeitpunkten folgt der *komplexe Kohärenzgrad* (Complex Degree of Coherence, CDC)

$$\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2) = \frac{\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)}{\sqrt{\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1; t_1, t_1)} \sqrt{\Gamma(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2; t_2, t_2)}} \quad (1.17)$$

Es folgt $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}; t, t) = 1$ und aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung $|\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)| \leq 1$. Es sei für die Verteilung Stationarität (zeitliche Abhängigkeit nur von $\tau = t_2 - t_1$) und Ergodizität angenommen, sodass das Ensemble-Mittel durch das Zeitmittel ($\langle \cdot \rangle$) ersetzt werden kann. Die *Kreuz-Spektraldichte* (Cross-Spectral Density, CSD)

$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \nu)$ ist die entsprechende Korrelationsfunktion der spektralen Amplituden (Fouriertransformierte der skalaren komplexen Amplitude bezüglich τ). Nach dem Wiener-Khintchine-Theorem ist die CSD die Fouriertransformierte der MCF [28]. Für einen quasi-monochromatischen Strahl kann die CSD durch den Wert an der mittleren Frequenz $\bar{\nu}$ approximiert werden. Rücktransformation von $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \bar{\nu})\delta(\nu - \bar{\nu})$ liefert $\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau) \simeq W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \bar{\nu}) \exp[2\pi\bar{\nu}\tau]$. Der Gültigkeitsbereich der Näherung ist auf $|\tau| \ll 1/\Delta\nu$ beschränkt. Die zeitunabhängige *wechselseitige Intensität* (Mutual Intensity, MI) lautet

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0) \quad (1.18)$$

Die entsprechende normierte Funktion

$$j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\sqrt{J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)}\sqrt{J(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2)}} \quad (1.19)$$

wird meist (wie $\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)$) als *komplexer Kohärenzgrad* bezeichnet und es gilt analog $j(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1$ sowie $|j(\mathbf{x}, \mathbf{x})| \leq 1$. Die wechselseitige Intensität erfüllt die Bedingung

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = J^*(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (1.20)$$

und kann nach (1.18, 1.19) in der folgenden Form dargestellt werden

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sqrt{I(\mathbf{r}_1)}\sqrt{I(\mathbf{r}_2)} g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp\left[i\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right] \quad (1.21)$$

mit reellwertigem *Kohärenzgrad* $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ und der *wechselseitigen Phase* (Mutual Phase) $\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Aus dem Kohärenzgrad lässt sich der *globale (transversale) Kohärenzgrad* (Global Degree of Transverse Coherence) bilden [29]

$$K = \frac{\iint d^2x_1 d^2x_2 (g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2))^2 I(\mathbf{x}_1) I(\mathbf{x}_2)}{[\int d^2x I(\mathbf{x})]^2} \quad (1.22)$$

wobei $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$ die transversalen Komponenten von \mathbf{r}_i bezeichnet ($i = 1, 2$) und $0 \leq K \leq 1$ gilt. Zur besseren Lesbarkeit ist hier und im Folgenden nur ein Integralzeichen für jede Gruppe von Differentialen (d^2x_1, d^2x_1, \dots) explizit angegeben. Die Integration erstreckt sich für alle Integrationsvariablen über \mathbb{R} sofern keine anderen Angaben gemacht werden. Die weitere Diskussion ist einfacher in einer Phasenraum-Darstellung mit zwei Orts- und zwei Winkelvariablen, die im nächsten Abschnitt eingeführt wird.

1.3.2 Die Wignerfunktion für partiell kohärentes Licht

Die Wignerfunktion wurde 1932 von Eugene Wigner als Quasi-Wahrscheinlichkeitsverteilung im Ort-Impuls-Phasenraum eingeführt um statistische Ensembles im Rahmen der Quantenmechanik zu beschreiben [30]. Die Wignerfunktion kann mit tomographischen Verfahren bestimmt werden [31, 32], wie experimentell demonstriert an verschiedenen physikalischen Systemen, z. B. nichtklassische Photonenzustände [33], Helium Atome [34] und unlängst auch im Röntgenbereich an

Synchrotronquellen [35] und Freie-Elektronen-Lasern [36]. Dieses Verfahren wird auch hier verwendet (in leicht angepasster Form) und in Kapitel 6 näher beschrieben. Mit *Wignerfunktion* wird hier die folgende zweidimensionale Fouriertransformation über die wechselseitige Intensität bezeichnet

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int d^2 s J\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{s}}{2}, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) \exp(-i k \mathbf{u} \mathbf{s}) \quad (1.23)$$

angelehnt an die Definitionen in den Referenzen [37, 38], die auf eine frühere Anwendung in der Radiometrie zurückgehen [39]. Wie im vorangegangenen Abschnitt erstreckt sich die Integration über \mathbb{R} , sofern keine anderen Angaben gemacht werden. Die Wignerfunktion ist reellwertig, kann aber auch negative Werte annehmen. Die beiden Marginalverteilungen bezüglich \mathbf{x} und \mathbf{u}

$$I(\mathbf{x}) = \int d^2 u h(\mathbf{x}, \mathbf{u}), \quad I(\mathbf{u}) = \int d^2 x h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (1.24)$$

sind hingegen nicht-negativ und können als Intensitätsverteilung nach dem Ort (Positional Intensity) bzw. der Richtung (Directional Intensity) interpretiert werden [40]. Im Fall der Marginalverteilung bezüglich \mathbf{x} folgt dies sofort durch Einsetzen der Definition (1.23), Integration über \mathbf{u} und der Tatsache, dass nach Definition der wechselseitigen Intensität (1.18) $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = I(\mathbf{x})$ gilt.

Die Momente der Wignerfunktion, insbesondere die der ersten und zweiten Ordnung, spielen bei der Charakterisierung von Laserstrahlen eine wichtige Rolle [14] und sind hier definiert als [22]

$$\langle x^i y^j u^k v^l \rangle = \frac{1}{P} \iint d^2 x d^2 u \cdot x^i y^j u^k v^l \cdot h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (1.25)$$

wobei hier $\mathbf{x} = (x, y)$ und $\mathbf{u} = (u, v)$. P bezeichnet die gesamte Strahlleistung in der $x y$ -Ebene und ergibt sich nach Definition der Wignerfunktion durch Integration über die \mathbf{x} - und \mathbf{u} -Variablen. Analog können lokale Momente der Winkelvariablen definiert werden [22]

$$\langle u^k v^l \rangle_{\text{lok}}(\mathbf{x}) = \frac{\int d^2 u u^k v^l h(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{\int d^2 u h(\mathbf{x}, \mathbf{u})} = \frac{1}{I(\mathbf{x})} \int d^2 u u^k v^l h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (1.26)$$

Im nächsten Abschnitt wird gezeigt, dass die ersten Winkelmomente gerade den transversalen Komponenten des normierten Poyntingvektors entsprechen, also in engem Zusammenhang mit der Wellenfront stehen.

1.3.3 Bestimmung der Wellenfront aus der Wignerfunktion

Im vollkohärenten Fall und mit der komplexen Amplitude $u(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) \exp[i\phi(\mathbf{x})]$, wobei $A, \phi \in \mathbb{R}$, kann die wechselseitige Intensität in der Form

$$J(\mathbf{x}; \mathbf{s}) = A\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{s}}{2}\right) A\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) \exp\left[i\left(\phi(\mathbf{x}; \mathbf{s}) - \phi(\mathbf{x}; -\mathbf{s})\right)\right] \quad (1.27)$$

ausgedrückt werden. Zur vereinfachten Darstellung werden \mathbf{x}, \mathbf{s} anstelle von $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ als Argument angegeben, gekennzeichnet durch ein Semikolon. Das erste lokale Winkelmoment entspricht dem normierten, transversalen Poyntingvektor $\hat{\mathbf{S}}$, lässt sich also als lokale Abstrahlrichtung interpretieren. Dies sieht man durch Einsetzen von (1.27, 1.23) in (1.26) und anschließendem Vergleich mit den Ausdrücken für $\mathbf{S}_\perp(\mathbf{x})$ (1.13) und den Wellenfrontgradienten $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x})$ (1.15)

$$\langle \mathbf{u} \rangle_{lok}(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \nabla_\perp \phi(\mathbf{x}) \stackrel{1.13}{=} \langle \mathbf{S}_\perp \rangle / I(\mathbf{x}) \stackrel{1.15}{=} \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) \quad (1.28)$$

Die Interpretation des ersten lokalen Winkelmoments als lokale Ausbreitungsrichtung behält auch für partiell kohärente Strahlen Gültigkeit [22], da die Wignerfunktion (wie auch die wechselseitige Kohärenzfunktion [41]) in kohärente Moden entwickelt werden kann [37] (unter recht allgemeinen Bedingungen, siehe zitierte Veröffentlichung). Identifiziert man also das erste lokale Winkelmoment mit dem Wellenfrontgradienten und berechnet dieses für eine wechselseitige Intensität der Form (1.21), so folgt

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \nabla_{\mathbf{s}} \alpha(\mathbf{x}; \mathbf{s} = 0) \quad (1.29)$$

Zusammenfassend gilt, dass die Wellenfront in der geometrischen Optik eine Isofläche des Eikonals ist und Strahlen sich entlang des Normalenvektors an die Wellenfront ausbreiten. Auch wellenoptisch konnten Phasengradient und Wellenfrontgradient direkt verknüpft werden, jedoch wurde ein paraxialer Strahl angenommen und es wurden Einschränkungen bezüglich der Polarisation getroffen. Im partiell kohärenten Fall lässt sich der Wellenfrontgradient auf die wechselseitige Phase zurückführen.

2 Die Propagation von Strahlen durch optische Systeme

In diesem Kapitel werden grundlegende Eigenschaften der Propagation von Strahlen durch optische Systeme beschrieben. Hier sind die Propagationseigenschaften aus zwei Gründen bedeutsam: zum einen kann durch das Propagationsverhalten der Strahl selbst charakterisiert werden (Abschnitt 2.2) und zum anderen trägt der Strahl nach Durchgang durch ein optisches System Informationen, die zur Optimierung des Systems verwendet werden können (Abschnitt 2.3).

2.1 Propagation der Kohärenzfunktion und das Gauß-Schell-Modell

2.1.1 Propagation der komplexen Amplitude

Das Dirichlet-Problem der Helmholtzgleichung (1.2) (Funktionswerte auf dem Rand vorgegeben) für den Halbraum $z \geq 0$ wird durch das *Rayleigh-Sommerfeld-Beugungsintegral* („RS-Integral“) erster Art

$$V(x, y, z) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta V(\xi, \eta, 0) \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \right]_{z=0} \quad (2.1)$$

gelöst, wobei (ξ, η) die transversalen Koordinaten eines Punktes in der Ebene $z = 0$ sind und $R = \sqrt{(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2 + z^2}$. Herleitung, Anwendungsbeispiele und das RS-Integral zweiter Art, eine Lösung des entsprechenden Neumann-Problems (Normalenableitung auf dem Rand vorgegeben), sind z. B. in Kapitel 8.11 aus „Principles of Optics“ von Max Born und Emil Wolf zu finden [20]. Die Ableitung der Kugelwelle nach z lautet

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) = \frac{e^{ikR}}{R} \left(ik - \frac{1}{R} \right) \cos(\theta) \quad (2.2)$$

mit dem Neigungsfaktor $\cos(\theta)$, berechnet aus dem Winkel θ , den der Verbindungsvektor der Punkte $(\xi, \eta, 0)$ und (x, y, z) mit der Normalen der Ebene $z = 0$ bildet. Hier wird ausschließlich der Fall $R \gg \lambda$ betrachtet, sodass der $1/R$ -Term in Gleichung (2.2) gegenüber dem ik -Term vernachlässigt werden kann. In paraxialer Näherung vereinfachen sich analytische und numerische Berechnungen, indem der Exponent des RS-Integrals bis zur zweiten Ordnung in ξ/z , η/z , x/z und y/z um null entwickelt wird und sonst $R = z$ gesetzt wird. Das Beugungsintegral lässt sich als Fouriertransformation schreiben.

$$V(x, y, z) = -\frac{i}{\lambda z} e^{ikz} e^{\frac{ik}{2z}(x^2+y^2)} \mathcal{F} \left[V(\xi, \eta, 0) e^{\frac{ik}{2z}(\xi^2+\eta^2)} \right] \left(\frac{kx}{z}, \frac{ky}{z} \right) \quad (2.3)$$

Die Notation wird in Anhang „Liste verwendeter Definitionen, Abkürzungen und Symbole“ erläutert. Physikalisch betrachtet wurde angenommen, dass nur solche Strahlen beitragen, die nahe der z -Achse liegen, man spricht von *Fresnel-Beugung*. Mathematisch gesehen handelt es sich um eine Näherungslösung des RS-Integrals nach dem Prinzip der stationären Phase (siehe z. B. Kapitel 3.3 in [28]).

Das *Collinsintegral* ist eine Verallgemeinerung des Fresnelschen Beugungsintegrals für allgemeine ABCD-Systeme, die in Abschnitt 2.2.1 näher beschrieben werden [42, 43],

$$u(\mathbf{r}_N) = -\frac{i n_N}{\lambda_0 \sqrt{\det \mathbf{B}}} e^{ik_0 L} \int d^2 r_1 u(\mathbf{r}_1) \times \exp \left[i \frac{\pi}{\lambda_0} \left(n_1 \mathbf{r}_1 \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{r}_1 - 2 n_1 \mathbf{r}_1 \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_N + n_N \mathbf{r}_N \mathbf{D} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_N \right) \right] \quad (2.4)$$

$$L = \sum_{i=1}^N n_i (z_i - z_{i-1}) \quad (2.5)$$

mit den stückweise konstanten Brechungsindizes n_i zwischen den Grenzflächen bei z_i und der Wellenlänge im Vakuum λ_0 . \mathbf{r}_i bezeichnet die transversalen Komponenten an den Flächen $z = z_i$. \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{D} sind Untermatrizen aus einer Systemmatrix (2.24). Das Fresnelintegral ist ein Spezialfall des Collinsintegrals für ein ABCD-System, das nur aus einer freien Propagation in einem homogenen Medium besteht.

Der Gültigkeitsbereich des Collinsintegrals in Bezug auf Wellenlänge und Geometrie des Beugungsproblems, der im Folgenden näher umrissen wird, entspricht dem des Fresnelintegrals. Um das qualitative Verhalten der Beugungsintegrale abzuschätzen, betrachtet man den quadratischen Phasenterm und definiert die *Fresnelzahl*

$$N_F = \frac{a^2}{\lambda z} \quad (2.6)$$

mit dem Aperturradius a und der Propagationsdistanz z . Verallgemeinert kann für a auch der Strahlradius eingesetzt werden um eine Abschätzung zu treffen (wie bei der Behandlung des Teststrahls in Kapitel 8). Bei $N_F \gg 1$ oszilliert die Exponentialfunktion schnell und nur benachbarte Punkte in der Apertur interferieren konstruktiv. Die Wellenoptik geht in die Strahlenoptik über (Kurzwellenasymptotik 1.2.1). Gilt dagegen $N_F \sim 1$ (Fresnel-Beugung), tragen alle Punkte innerhalb der Apertur wesentlich zur komplexen Amplitude an einem bestimmten Punkt in der Austrittspupille bei. Ist die quadratische Phase wesentlich kleiner als 2π , also $N_F \ll 1$, kann der Exponentialterm in (2.3) vernachlässigt werden und die Propagation wird durch eine einfache Fouriertransformation der komplexen Amplitude in der Eintrittspupille beschrieben. Man spricht von *Fraunhofer-Beugung* und vom *Fernfeld*. Die Intensität hängt dann nur noch vom Verhältnis x/z bzw. y/z ab und das Intensitätsprofil wird bei Propagation im Fernfeld lediglich in der Größe skaliert.

Eine elegante Lösung der paraxialen Wellengleichung ist die Entwicklung in Moden. Der Gaußstrahl und die Gauß-Moden höherer Ordnung (Hermite-Gauß-Moden in kartesischen und Laguerre-Gauß-Moden in zylindrischen Koordinaten) sind Lösungen der paraxialen Wellengleichung und zeigen in allen z -Ebenen das oben erwähnte Skalierungsverhalten. Man spricht daher auch von den Eigenmoden der freien Propagation [44]. Die Hermite-Gauß-Moden werden in Kapitel 6 verwendet um die Rekonstruk-

tion der Wignerfunktion zu interpretieren. Sie faktorisieren in der Form $u_{nm}(x, y, z) = u_n(x, z)u_m(y, z)$ [45]

$$u_n(x, z) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\exp[-i(2n+1)(\psi(z) - \psi_0)]}{2^n n! w(z)}} \quad (2.7)$$

$$\times H_n\left(\frac{\sqrt{2}x}{w(z)}\right) \exp\left[i\frac{kx^2}{2R(z)} - \frac{x^2}{w^2(z)}\right]$$

mit den Hermite-Polynomen $H_n(x)$ sowie dem Krümmungsradius der Phase $R(z)$, der Breite $w(z)$, der Gouy-Phase $\psi(z)$ und der konstanten Phase ψ_0 , die gegeben sind durch

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z - z_0}{z_R}\right)^2}, \quad R(z) = z - z_0 + \frac{z_R^2}{z - z_0} \quad (2.8)$$

$$\psi(z) = \arctan\left(\frac{z - z_0}{z_R}\right) \quad (2.9)$$

z_0 ist die Lage der Strahltaile und z_R die Rayleighlänge. Die Breite $w(z)$ entspricht dem halben Varianzdurchmesser (2.38) der Grundmode. An der Strahltaile ist $w(0) = w_0 = \sqrt{2z_R/k}$, sodass eine Mode bei gegebener Wellenlänge vier freie Parameter (zwei je Koordinatenachse, z. B. w_0 und z_0) besitzt. Nach der hier gewählten Vorzeichenkonvention ist ein Strahl mit positivem Krümmungsradius R divergent. Die Gouy-Phase bewirkt, dass der Gaußstrahl beim Durchgang durch den Fokus gegenüber einer ebenen Welle eine zusätzliche Phase π erhält. Die Hermite-Polynome erfüllen die Differentialgleichung

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (2.10)$$

und können mittels der Rekursionsrelation

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (2.11)$$

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x$$

berechnet werden [46]. Die Funktionen u_n sind orthonormiert

$$\int dx u_n^*(x, z) u_m(x, z) = \delta_{nm} \quad (2.12)$$

und jede Lösung der paraxialen Wellengleichung kann in diese Grundlösungen entwickelt werden [45]

$$u(x, y, z) = \sum_n \sum_m c_{nm} u_n(x, z) u_m(y, z) \quad (2.13)$$

$$c_{nm} = \iint dx dy u(x, y, z) u_n^*(x, z) u_m^*(y, z) \quad (2.14)$$

Die Entwicklungskoeffizienten c_{nm} hängen von der Wahl der freien Parameter (z. B. z_0 und w_0) ab. Mehr zu den Hermite-Gauß-Moden inklusive einer Herleitung aus der paraxialen Wellengleichung ist in Kapitel 16.4 aus „Lasers“ von Anthony Siegman gegeben [43].

2.1.2 Propagation der Kohärenzfunktion

Analog zur komplexen Amplitude genügt die wechselseitige Kohärenzfunktion (MCF) im freien Raum den homogenen Wellengleichungen bezüglich \mathbf{r}_1, t_1 und \mathbf{r}_2, t_2 [28]. Damit können die Propagationsgesetze der komplexen Amplitude, die in Abschnitt 2.1.1 dargestellt wurden, unmittelbar auf den quasi-monochromatischen, partiell kohärenten Fall übertragen werden. Analog zum Rayleigh-Sommerfeld-Beugungsintegral der ersten Art lautet die Propagation der wechselseitigen Intensität (MI) im Halbraum $z \geq 0$ [28]

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \iint_{z=0} \frac{d^2\xi_1}{2\pi} \frac{d^2\xi_2}{2\pi} J(\xi_1, \xi_2) \left[\frac{\partial}{\partial z_1} \left(\frac{e^{ikR_1}}{R_1} \right) \right] \left[\frac{\partial}{\partial z_2} \left(\frac{e^{-ikR_2}}{R_2} \right) \right] \quad (2.15)$$

mit den Ortsvektoren $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ und $\xi_i = (\xi_i, \eta_i, 0)$ sowie $R_i = |\xi_i - \mathbf{r}_i|$ ($i = 1, 2$).

Im vollkohärenten Fall kann die MI in Hermite-Gauß-Moden entwickelt werden, wie unmittelbar aus der Entwicklung der komplexen Amplitude (2.7) folgt. Im partiell kohärenten Fall kann eine Entwicklung in kohärente Moden vorgenommen werden. Die Argumentation aus „Optical Coherence and Quantum Optics“ von Leonard Mandel und Emil Wolf [28] wird im Folgenden kurz skizziert. Eine detailliertere Darstellung findet man dort oder in der Veröffentlichung [41].

Es wird ein endliches Gebiet D betrachtet, in dem gilt

$$\iint_D d^3r_1 d^3r_2 |J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 < \infty \quad (2.16)$$

Damit kann die wechselseitige Intensität als hermitescher Kern (1.20) eines Hilbert-Schmidt-Integraloperators aufgefasst werden mit der Eigenwertgleichung (Fredholm Integralgleichung zweiter Art)

$$\int d^3r_1 J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_n(\mathbf{r}_1) = \alpha_n \psi_n(\mathbf{r}_2) \quad (2.17)$$

Der Kern kann dann durch die Entwicklung

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_n \alpha_n \psi_n^*(\mathbf{r}_1) \psi_n(\mathbf{r}_2) \quad (2.18)$$

dargestellt werden. Aufgrund der semi-positiven Definitheit von $J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ [47, 48] konvergiert die Reihe gleichmäßig und alle α_n sind nicht-negative reelle Zahlen. Die so gewonnene Darstellung der wechselseitigen Intensität kann als eine Entwicklung in vollkohärente Moden $J_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ interpretiert werden, da $J_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \psi_n^*(\mathbf{r}_1) \psi_n(\mathbf{r}_2)$ die Helmholtzgleichung bezüglich \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 erfüllt.

Zuletzt sei der wichtige Spezialfall einer vollständig inkohärenten planaren Quelle, beschränkt auf die Fläche σ , betrachtet. Dann gilt die wechselseitige Intensität $J(\xi_1, \xi_2) = I(\xi_1) \delta^{(2)}(\xi_1 - \xi_2)$ und es folgt Zernikes Propagationsgesetz für die wechselseitige Intensität [28] aus (2.15)

$$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\lambda} \int_{\sigma} d^2\xi I(\xi) \frac{e^{ik(R_1 - R_2)}}{R_1 R_2} \quad (2.19)$$

wobei die die $1/R^2$ -Terme vernachlässigt wurden. Im Fall $z_1 = z_2 = z$ und in Fraunhofer-Näherung ist der komplexe Kohärenzgrad bis auf einen Phasenfaktor die Fouriertransformierte der Intensitätsverteilung

$$j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\left[\frac{ik}{2z}(\mathbf{r}_{1\perp}^2 - \mathbf{r}_{2\perp}^2)\right] P^{-1} \mathcal{F}[I(\boldsymbol{\xi})](k(\mathbf{r}_{1\perp} - \mathbf{r}_{2\perp})/z) \quad (2.20)$$

P ist die gesamte Leistung der planaren Quelle und der Index „ $(\cdot)_\perp$ “ bezeichnet die transversalen Komponenten. Diesen Zusammenhang, erstmals 1934 von van Cittert beschrieben, nennt man *van Cittert-Zernike Theorem* [49, 50]. Für eine homogene und voll-inkohärent ausgeleuchtete kreisförmige Blende mit Radius a gilt dann $|j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)| = |2J_1(\chi)/\chi|$ mit der Besselfunktion der ersten Art J_1 und $\chi = ak|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|/z$. Mit dieser Lösung kann der komplexe Kohärenzgrad (CDC) gut veranschaulicht werden: hier entspricht er gerade dem normierten Airy-Profil des Amplitudenbetrags der gleichen Apertur (wobei der Amplitudenbetrag eine Funktion des Abstandes vom Zentrum ist, der CDC jedoch vom Abstand zweier Punkte abhängt).

2.1.3 Das Gauß-Schell-Modell

In vielen Fällen kann eine Strahlquelle durch eine vereinfachte Quelle modelliert werden, die ähnliche Eigenschaften aufweist, aber rechnerisch einfacher zu handhaben ist. Schell-Modell-Quellen [51] sind charakterisiert durch eine endliche Ausdehnung, Stationarität und einen komplexen Kohärenzgrad, der nur von der Differenz $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ abhängt [28]. Ist dieser zudem eine Gauß-Funktion, so spricht man vom *Gauß-Schell-Modell* (GSM). Der Gaußstrahl wird als vollkohärenter Spezialfall durch das GSM beschrieben. Für die x - und y -Richtung werden unterschiedliche Parameter zugelassen, sodass $J(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = J_x(x_1, x_2)J_y(y_1, y_2)$ gilt [52]. Es gilt das Propagationsgesetz [53, 54]

$$J_x(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; z) = \sqrt{I_x(x_1)I_x(x_2)} \exp\left(\frac{-(x_1 - x_2)^2}{2\sigma_{gx}^2(\Delta_x(z))^2} + \frac{ik(x_2^2 - x_1^2)}{2R_x(z)}\right) \quad (2.21)$$

mit

$$I_x(x) = \frac{A}{\Delta_x(z)} \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma_{sx}^2(\Delta_x(z))^2}\right), \quad \Delta_x(z) = \sqrt{1 + \left(\frac{z}{k\sigma_{sx}\delta_x}\right)^2} \quad (2.22)$$

$$R_x(z) = z \left[1 + \left(\frac{k\sigma_{sx}\delta_x}{z}\right)^2\right], \quad \frac{1}{\delta_x^2} = \frac{1}{(2\sigma_{sx})^2} + \frac{1}{\sigma_{gx}^2}$$

(y -Terme analog). Wie man sieht, ist das Verhältnis $q = \sigma_g/\sigma_s$ aus der Breite der Intensitätsverteilung σ_s und der Breite des komplexen Kohärenzgrades σ_g propagationsinvariant und somit ein geeignetes Maß für den globalen (transversalen) Kohärenzgrad des Strahls. Zum besseren Vergleich mit anderen Strahlen kann q auf den allgemeineren globalen Kohärenzgrad K (1.22) zurückgeführt werden. Wegen der Separierbarkeit gilt hier $K = K_x K_y$ mit

$$K_x = \frac{\iint dx_1 dx_2 |J_x(x_1, x_2)|^2}{[\int dx J_x(x, x)]^2} \stackrel{\text{GSM}}{=} \frac{1}{\sqrt{1 + 4q_x^{-2}}} \leq 1 \quad (2.23)$$

d.h. im radialsymmetrischen Fall $K = 1/(1 + 4q^{-2})$ [52]. Da die x - und y -Komponenten getrennt behandelt werden können, ist der Gauß-Schell-Strahl einfach-astigmatisch (siehe Abschnitt 2.2.2). Das Maß M_i^2 (2.36) für die Strahlqualität in der Koordinatenrichtung i berechnet sich aus der oben angegebenen, allgemeinen Form des GSM-Strahls zu $M_i^2 = \sqrt{1 + 4q_i^{-2}}$. Es gilt also $M_i^2 = 1/K_i$ und $(M^2)^2 = 1/K$. Für volle Kohärenz ($K_i = 1$) erhält man das bekannte Ergebnis für den beugungsbegrenzten Gaußstrahl $M^2 = 1$.

In Kapitel 5 wird das GSM zur Abschätzung des Kohärenzeinflusses auf die Strahlparameter verwendet. Das Modell und seine Anwendung auf Synchrotronquellen und Freie-Elektronen-Laser wird in [52] beschrieben. Experimentelle Untersuchungen an FLASH [55] und LCLS [56] haben seine Eignung zur Abschätzung der Propagationseigenschaften demonstriert.

2.2 Strahlcharakterisierung nach der Methode der zweiten Momente

Die Charakterisierung von Laserstrahlen durch die Methode der zweiten Momente ist ein etabliertes Verfahren zur Bestimmung der Propagationseigenschaften. In dieser Arbeit wird es zweifach eingesetzt: Erstens zur Auswertung von Strahlprofilen in mehreren planparallelen Ebenen senkrecht zur Strahlachse, nach ISO 11146 [14], zweitens zur Bestimmung der Strahlparameter aus den Messwerten des Hartmann-Sensors, näher beschrieben in Kapitel 4.

2.2.1 Matrizenoptik und ABCD-Systeme

In der paraxialen geometrischen Optik ($\sin \alpha \approx \tan \alpha \approx \alpha$, α ist der Winkel des Strahls zur optischen Achse) wird die Propagation eines Strahls mit vierdimensionalem Strahlvektor \mathbf{r}_1 von einer Ausgangsebene $z = z_1$ durch ein Gebiet mit stückweise konstantem Brechungsindex zu einer planparallelen zweiten Ebene bei $z = z_2$ durch eine lineare Abbildung vermittelt.

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \partial_z \mathbf{x} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix}, \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix}, \mathbf{r}_2 = \mathbf{M} \mathbf{r}_1 \quad (2.24)$$

mit den transversalen Ortskomponenten $\mathbf{x} = (x, y)$ und den 2×2 -Blöcken \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} und \mathbf{D} . Die Blockmatrix \mathbf{M} wird, nach der üblichen Bezeichnung ihrer Einträge, auch *ABCD-Matrix* genannt, das optische System *ABCD-System*. Oft werden die Winkelkoordinaten zusätzlich mit dem Brechungsindex multipliziert, $\tilde{\mathbf{r}} = (\mathbf{x}, n\mathbf{x}')$. Systemmatrizen $\tilde{\mathbf{M}}$ und das Collinsintegral (2.4) müssen entsprechend angepasst werden. Hier wird darauf meist zugunsten einer einheitlichen Beschreibung mit den Momenten der Wigner-Verteilung verzichtet.

Sei $\mathbf{r} = (r, r')$ ein Strahl in der Einfallsebene mit radialen Abstand r von der Strahlachse, der an einer Grenzfläche $z = \text{const}$ zwischen zwei Materialien mit den Brechungsindizes n_1 und n_2 gebrochen wird. Nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz gilt an der Grenzfläche für die Winkel θ_1 und θ_2 zum Lot [20]

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (2.25)$$

In paraxialer Näherung gilt $\sin\theta \approx \tan\theta = \partial_z r$ und es folgt $\partial_z r_2 = n_1/n_2 \cdot \partial_z r_1$. Die resultierende Matrix der Grenzfläche $\mathbf{M}_g(n_1, n_2)$ lautet (verallgemeinert auf 4x4-Matrizen)

$$\mathbf{M}_g(n_1, n_2) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & | & 0 \\ \hline - & - & - \\ 0 & | & \frac{n_1}{n_2} \cdot \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

mit der 2x2-Einheitsmatrix $\mathbb{1}$. Zwei weitere ABCD-Matrizen, die im Folgenden benötigt werden, beschreiben die dünne Linse $\mathbf{M}_f(f)$ mit Brennweite f (fokussierend für $f > 0$) und die freie Propagation $\mathbf{M}_p(L)$ über die Distanz L in einem homogenen Medium

$$\mathbf{M}_p(L) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & | & L \cdot \mathbb{1} \\ \hline - & - & - \\ 0 & | & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_f(f) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & | & 0 \\ \hline - & - & - \\ -\mathbb{1}/f & | & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

Zusammengesetzte Systeme berechnen sich durch Multiplikation der Matrizen der einzelnen optischen Elemente. Die Matrizen $\tilde{\mathbf{M}}$ sind symplektisch, d. h. es gilt

$$\tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{J} \tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & | & \mathbb{1} \\ \hline - & - & - \\ -\mathbb{1} & | & 0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

und die Zahl der freien Parameter der Matrix $\tilde{\mathbf{M}}$ reduziert sich von sechzehn auf zehn.

2.2.2 Propagation der Wignerfunktion und ihrer Momente durch ABCD-Systeme

Um das Propagationsgesetz der Wignerfunktion in einem homogenen Medium zu erhalten wird der Fall zweier planparalleler Ebenen betrachtet und es werden die Koordinaten $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x} + \mathbf{s}/2$, $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} - \mathbf{s}/2$, $\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\sigma}/2$ und $\boldsymbol{\xi}_2 = \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\sigma}/2$ in das Propagationsgesetz der wechselseitigen Intensität (2.15) eingesetzt. In Fresnelscher Näherung lautet das Propagationsgesetz dann [57]

$$J(\mathbf{x}; \mathbf{s}) = \frac{1}{\lambda^2 z^2} \iint_{z=0} d^2\xi d^2\sigma J(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\sigma}) \exp\left[\frac{ik}{z} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{s})\right] \quad (2.29)$$

Die entsprechenden Wignerfunktionen folgen durch Multiplikation mit $e^{-ik\mathbf{u}\mathbf{s}}/\lambda^2$ auf beiden Seiten und Integration über \mathbf{s}

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{u}, z) = h(\mathbf{x} - z\mathbf{u}, \mathbf{u}, 0) \quad (2.30)$$

Das so gefundene Propagationsgesetz lässt sich strahlenoptisch interpretieren: Der Wert der Wignerfunktion in der Ebene z am Punkt \mathbf{x} und unter dem Winkel \mathbf{u} ist gerade der Wert der Wignerfunktion am Durchstoßpunkt $\boldsymbol{\xi}$ des zurückverfolgten Strahls in der Ebene $z = 0$.

Ersetzt man das Fresnelintegral in (2.29) durch das Collinsintegral, folgt das Propagationsgesetz für allgemeine ABCD-Systeme \mathbf{M}

$$h(\mathbf{r}, z) = h(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}, 0) \quad (2.31)$$

mit $\mathbf{r} = (x, y, u, v)$ [37, 57].

Um eine kompakte Darstellung der Propagationsgesetze der Momente (1.25) zu erhalten, werden sie einem vierdimensionalen Strahlvektor \mathbf{t} und in der Matrix der zweiten Momente \mathbf{P} zusammengefasst

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} \langle x \rangle \\ \langle y \rangle \\ \langle u \rangle \\ \langle v \rangle \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \langle x^2 \rangle & \langle xy \rangle & \langle xu \rangle & \langle xv \rangle \\ \langle yx \rangle & \langle y^2 \rangle & \langle yu \rangle & \langle yv \rangle \\ \langle ux \rangle & \langle uy \rangle & \langle u^2 \rangle & \langle uv \rangle \\ \langle vx \rangle & \langle vy \rangle & \langle vu \rangle & \langle v^2 \rangle \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Die Matrix der zweiten Momente ist symmetrisch, besitzt also zehn freie Parameter. Aus dem Propagationsgesetz der Wignerverteilung und der Erhaltung des Phasenraumvolumens folgt sofort das einfache Propagationsgesetz für die ersten und zweiten Momente von einer Ebene $z = z_1$ zu der planparallelen Ebene $z = z_2$ durch ein ABCD-System \mathbf{M}

$$\mathbf{t}_2 = \mathbf{M} \mathbf{t}_1, \quad \mathbf{P}_2 = \mathbf{M} \mathbf{P}_1 \mathbf{M}^T, \quad (2.33)$$

Durch eine geeignete Wahl des Koordinatensystems können die ersten Momente eliminiert werden. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die ersten Momente verschwinden (für die zweiten Momente gilt dann $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$, etc.).

Das gemischte zweite Ortsmoment $\langle xy \rangle$ kann durch Drehung des Koordinatensystems um den Winkel

$$\phi = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2 \langle xy \rangle}{\langle y^2 \rangle - \langle x^2 \rangle} \right) \quad (2.34)$$

eliminiert werden, man spricht vom Hauptachsensystem der Nahfeldverteilung [22]. Analog verschwindet $\langle uv \rangle$ im Hauptachsensystem der Fernfeldverteilung, wobei die Winkel der beiden Verteilungen gegeneinander gedreht sein können.

Im vierdimensionalen Phasenraum existieren zwei unabhängige, unter Propagation durch ABCD-Systeme invariante Größen, die Determinante der Matrix \mathbf{P} und eine weitere Kombination zweiter Momente, die angibt, ob ein Strahl in einen stigmatischen Strahl (alle Blöcke der ABCD-Matrix sind Vielfache der Einheitsmatrix) transformiert werden kann [58]. Der Parameter M^2 (sprich: „ M Quadrat“) ist definiert durch [58, 14]

$$M^2 = 2k [\det \mathbf{P}]^{\frac{1}{4}} \geq 1 \quad (2.35)$$

wobei die Untergrenze für M^2 aus der Tatsache folgt, dass Orts- und Winkelvariablen durch Fouriertransformation auseinander hervorgehen (siehe z. B. den Anhang in der Veröffentlichung [59]). M^2 ist invariant unter Drehungen des Koordinatensystems in der xy -Ebene, da es nur von der Determinante von \mathbf{P} abhängt, nicht aber von einzelnen Momenten. $(M^2)^2$ ist ein Maß für das vom Strahl eingenommene Phasenraumvolumen.

Eine Intensitätsmessung in einer Ebene $z = \text{const}$ kann nur die Einträge des Blocks \mathbf{A} bestimmen. Die symmetrische 4×4 -Matrix der zweiten Momente besitzt jedoch im

allgemeinsten, *allgemein-astigmatisch* genannten Fall zehn freie Parameter. Eine Möglichkeit, alle Momente zu bestimmen, ist die zusätzliche Messung des lokalen Abstrahlwinkels, z. B. mittels eines Hartmann-Sensors (siehe Abschnitt 4.3). Mittels einer Messung in mehreren z -Ebenen können neun Parameter bestimmt werden, je drei aus dem quadratischen Propagationsgesetz für $\langle x^2 \rangle$, $\langle y^2 \rangle$ und $\langle xy \rangle$ in Abhängigkeit von z . Nicht bestimmbar auf diese Weise ist der Twist $t = \langle xv \rangle - \langle yu \rangle$ [60, 22] des Strahls. Durch Anordnungen mit einem zusätzlichen Freiheitsgrad kann auch der Twist bestimmt werden und somit alle zehn freien Einträge der Matrix \mathbf{P} . Eine entsprechende Messanordnung mit einer zusätzlich in den Strahlengang eingebrachten, drehbaren Zylinderlinse wird bei G. Nemes und A. Siegman beschrieben [58].

Einfacher ist die Situation im Spezialfall des *einfach-astigmatischen* Strahls. Für diesen verschwinden alle gemischten zweiten Momente bezüglich der x - und y -Achse ($\langle xy \rangle = \langle xv \rangle = \langle yu \rangle = \langle uv \rangle = 0$), ggf. nach einer geeigneten Drehung des Koordinatensystems in der xy -Ebene um denselben Winkel für alle Werte von z . Ein Strahl bleibt einfach-astigmatisch bei freier Propagation in einem homogenen Medium und in jedem anderen ABCD-System, das im Hauptachsensystem des Strahls durch eine ABCD-Matrix aus vier Diagonalmatrizen beschrieben wird. Die Matrix \mathbf{P} eines solchen Strahls, die aus vier Diagonalmatrizen besteht, besitzt 2×3 freie Parameter. Diese können aus dem quadratischen Propagationsgesetz für $\langle x^2 \rangle$ und $\langle y^2 \rangle$ bestimmt werden, beschrieben in der ISO-Norm 11146 [14].

2.2.3 Bestimmung der Strahlparameter nach ISO-Norm 11146

Die Bestimmung der Strahlparameter nach ISO 11146 gilt für einfach-astigmatische Strahlen, d. h. die Matrix der zweiten Momente \mathbf{P} besteht aus vier diagonalen Blöcken. Da außerdem lediglich freie Propagationsstrecken betrachtet werden, können die x - und die y -Achse getrennt durch je eine 2×2 -Matrix beschrieben werden (die y -Ausdrücke werden ganz analog zu den gezeigten Ausdrücken für x gebildet). Die Determinante der 2×2 -Matrix der 2. Momente ist ebenfalls erhalten und es gilt [58]

$$M_x^2 = 2k \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle u^2 \rangle - \langle xu \rangle^2} \geq 1, \quad M^2 = \sqrt{M_x^2 M_y^2} \quad (2.36)$$

Das zweite Ortsmoment in einer Ebene mit Abstand z folgt aus dem Propagationsgesetz (2.33), der Matrix der zweiten Momente \mathbf{P} (2.32) und der Systemmatrix \mathbf{M}_p (2.27) (auch für allgemein-astigmatische Strahlen) zu

$$\langle x^2 \rangle(z) = \langle x^2 \rangle + 2z \langle xu \rangle + z^2 \langle u^2 \rangle \quad (2.37)$$

Nun werden die zweiten Ortsmomente $\langle x^2 \rangle$ für verschiedene Abstände z gemessen und die verbleibenden Momente durch quadratischen Fit über dem Abstand bestimmt. Die Prozedur ist in Kapitel 6 näher beschrieben.

Es werden die folgenden Kombinationen der nun bekannten Momente gebildet [22]: Strahldurchmesser d_x , Divergenz θ_x , Lage der Strahltaille z_{0x} , Krümmungsradius R_x , Strahldurchmesser an der Strahltaille d_{0x} und Rayleighlänge z_{Rx}

$$\begin{aligned} d_x &= 4\sqrt{\langle x^2 \rangle} & \theta_x &= 4\sqrt{\langle u^2 \rangle} \\ z_{0x} &= -\frac{\langle xu \rangle}{\langle u^2 \rangle} & R_x &= \frac{\langle x^2 \rangle}{\langle xu \rangle} \\ d_{0x} &= 4\sqrt{\langle x^2 \rangle - \frac{\langle xu \rangle^2}{\langle u^2 \rangle}} & z_{Rx} &= \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle u^2 \rangle} - \frac{\langle xu \rangle^2}{\langle u^2 \rangle^2}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Die Definition des Durchmessers erfolgt über die Varianz der Intensitätsverteilung. Der Faktor vier ist zu einem gewissen Grad willkürlich, bewirkt aber, dass man für eine homogen beleuchtete, kreisrunde Blende gerade den Blendendurchmesser als Strahldurchmesser erhält. Die Terme orientieren sich eng an der vertrauten Begrifflichkeit des Gaußstrahls. Man erhält durch gegenseitiges einsetzen

$$d_x(z) = d_{0x} \sqrt{1 + \left(\frac{z - z_{0x}}{z_{Rx}} \right)^2} \quad R_x = z - z_{0x} + \frac{z_{Rx}^2}{z - z_{0x}} \quad (2.39)$$

Damit lassen sich alle weiteren Ausdrücke wie folgt interpretieren: z_0 ist der Wert von z , für den der Strahldurchmesser den minimalen Wert d_{0x} annimmt. In einem Abstand z_{Rx} von der Strahltaille ist der Durchmesser gerade um den Faktor $\sqrt{2}$ angewachsen. Die Divergenz berechnet sich aus dem Limes $\theta_x = \lim_{z \rightarrow \infty} (d_x/z) = d_{0x}/z_{Rx}$, und es folgt die oben gegebene Form von θ_x , die nur von u abhängt. Daher wird die Bezeichnung *Fernfeldkoordinaten* für u und v verwendet. Der oben angegebene Krümmungsradius folgt aus derjenigen Parabel, deren Gradienten die Wellenfrontgradienten bestmöglich intensitätsgewichtet approximieren (siehe [22]).

2.3 Aberrationen optischer Systeme

Die Abweichungen der zwischen Gaußscher Optik und tatsächlichem Strahlengang bezeichnet man als *Aberrationen*. Man unterscheidet monochromatische Aberrationen und chromatische Aberrationen, die auftreten, weil Strahlen unterschiedlicher Wellenlänge unterschiedliche Wege durch das optische System nehmen. Hier werden nur erstere behandelt, denn die reflektiven Optiken der FEL-Beamlines zeigen keine chromatischen Fehler.

Die Korrektur der Aberrationen ist eine der zentralen Aufgaben bei der Konstruktion eines optischen Instruments, dementsprechend existiert sehr umfangreiche Literatur zu diesem Thema, die hier nicht vollständig wiedergegeben werden kann. Im Wesentlichen folgt die Darstellung „Aberrations of optical systems“ von Walter Welford [61] und den Kapiteln IV, V und IX in „Principles of Optics“ von Max Born und Emil Wolf [20].

2.3.1 Geometrisch-optische Einführung in die Theorie der Aberrationen

Das Konzept der Aberrationen wird sowohl in der geometrischen Optik als auch in der Wellenoptik verwendet. Sei zunächst der geometrisch-optische Fall einer Abbildung von einem Punkt P_0 in der Ebene Σ_0 im Objektraum zu einem Punkt P_1 in der Ebene Σ_1 im Bildraum betrachtet. Diese ist gegeben, wenn sich alle von P_0 ausgehenden Strahlen (bis auf evtl. Verluste) im Punkt P_1 schneiden. Eine ideale Abbildung zwischen der Ebene Σ_0 und der Ebene Σ_1 ist gegeben, wenn für jeden Punkt in Σ_0 ein Punkt in Σ_1 existiert auf den er abgebildet wird und die Koordinaten des Bildpunktes proportional zu den Koordinaten des Objektpunktes sind [61].

In der *Gaußschen Optik* wird verlangt, dass die Entwicklung der geometrischen Wellenfront nach den transversalen Koordinaten nach der zweiten Ordnung abgebrochen werden kann (alternativ kann die charakteristische Funktion entwickelt werden, über das Eikonal sind beide Größen verknüpft). Für ein rotationssymmetrisches, gaußsches optisches System hängen die Koordinaten des Bildpunktes linear von den Koordinaten des Objektpunktes ab, wie aus Symmetrieerwägungen geschlossen werden kann [61]. Es existiert also eine ideale Abbildung zwischen zwei Ebenen und die Gaußsche Optik ist ein geeignetes Referenzsystem, gegenüber dem die Aberrationen explizit definiert werden.

Gegeben sei ein rotationssymmetrisches, abbildendes optisches System mit dem Ausgangspunkt P_0 eines Strahls im Objektraum, einer Austrittspupille mit Zentrum C und transversalen Koordinaten (ξ, η) , dem Gaußschen Bildpunkt $P_1^* = (x^*, y^*)$ von P_0 und dem tatsächlichen Durchstoßpunkt P_1 des Strahls in der Gaußschen Bildebene. Die Differenz $\overline{P_1^*P_1}$ heißt *Strahl aberration*. Alle (hypothetischen) Gaußschen Strahlen, die sich von der Austrittspupille ausgehend in P_1^* schneiden, definieren eine geometrische Wellenfront, die Referenzsphäre mit Zentrum bei P_1^* und Radius $R := \overline{CP_1^*}$. Dabei wird eine Wellenfront als in der Austrittspupille liegend betrachtet, wenn sie die Ebene der Austrittspupille auf der optischen Achse schneidet.

Seien Q_R der Schnittpunkt des Strahls mit der Referenzsphäre und Q_W der Schnittpunkt des Strahls mit der in der Austrittspupille liegenden tatsächlichen Wellenfront $W(\xi, \eta)$ der von P_0 ausgehenden Strahlen. Dann ist die *Wellenfront aberration* Φ gegeben durch die optische Weglänge von Q_R nach Q_W . Die Aberrationen können numerisch durch Simulation des Strahlengangs („Ray Tracing“) berechnet werden. Hier liegt das Hauptaugenmerk auf der Interpretation der mir dem Hartmann-Sensor gemessenen Wellenfront, wozu die in den folgenden Abschnitten beschriebene Entwicklungslösung dient. Die Wellenfront aberrationen hängen wegen der Rotationssymmetrie des abbildenden Systems nur von den drei Kombinationen ab

$$r^2 = x^{*2} + y^{*2} \quad \rho^2 = \xi^2 + \eta^2 \quad \kappa^2 = x^* \xi + y^* \eta \quad (2.40)$$

Die Entwicklung hat die Form $\Phi = \Phi^0 + \Phi^4 + \mathcal{O}^6$ und der Entwicklungskoeffizient eines Terms sei positiv, wenn die aberrierte Wellenfront weiter in Strahlrichtung fortgeschritten ist als die Referenzsphäre. Die Strahl aberrationen berechnen sich aus den Wellenfront aberrationen gemäß $\overline{P_1^*P_1} = -R \nabla_{(\xi, \eta)} \Phi$ (vgl. 1.8), d. h. eine Strahl aberration ist eine Entwicklungsordnung niedriger als die korrespondierende Wellenfront aberration. Hier bezeichnet die Ordnung einer Aberration immer die Entwicklungsord-

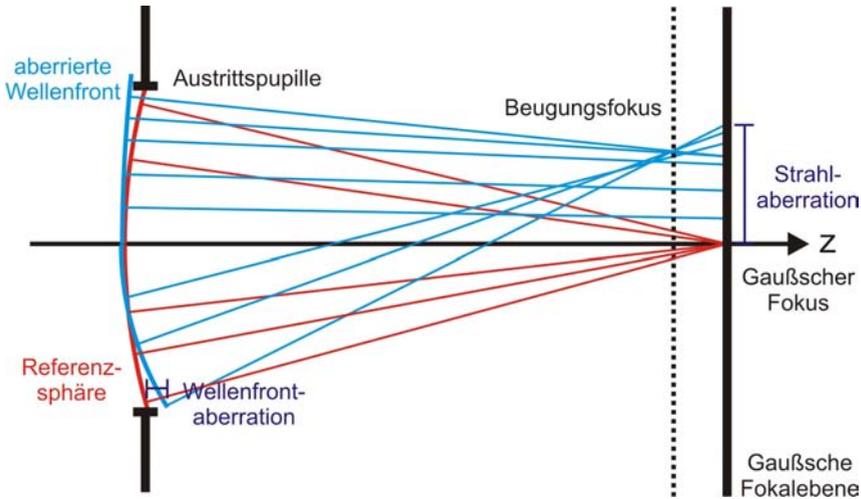


Abbildung 2.1: Wellenfront- und Strahlaberrationen

nung der Wellenfrontaberration. Die Entwicklung kann auch in den Objektkoordinaten durchgeführt werden, da diese linear von den Koordinaten des Gaußschen Bildpunktes abhängen. Wegen der Rotationssymmetrie kann angenommen werden, dass sich der Gaußsche Bildpunkt in der Meridionalebene befindet ($y^* = 0$) und die Entwicklung lautet explizit bis zur einschließlich vierten Ordnung [61]

$$\Phi = a_0 + a_1 (\xi^2 + \eta^2) + a_2 \xi x^* + a_3 x^{*2} + b_1 (\xi^2 + \eta^2)^2 + b_2 \xi x^* (\xi^2 + \eta^2) + b_3 \xi^2 x^{*2} + b_4 x^{*2} (\xi^2 + \eta^2) + b_5 \xi x^{*3} + b_6 x^{*4} + \mathcal{O}^6 \quad (2.41)$$

Die Terme mit den Koeffizienten a_0 , a_3 , und b_6 sind unabhängig von den Koordinaten ξ, η und werden somit eliminiert, wenn sowohl Referenz als auch Wellenfront im oben beschriebenen Sinne in der Austrittspupille liegen [61]. Mit dieser Festlegung existieren $\nu(\nu + 3)/2$ Entwicklungsterme für die Ordnung 2ν . Die fünf Aberrationskoeffizienten der vierten Ordnung geben den Grad an primären oder *Seidel-Aberrationen* der Wellenfront. Diese heißen im Einzelnen sphärische Aberration (b_1), Koma (b_2), Astigmatismus (b_3), Bildfeldwölbung (b_4) und Verzeichnung (b_5). Die Terme der zweiten Ordnung sind keine Aberrationen im engeren Sinne, da sie durch Wahl einer neuen Referenzsphäre mit angepasster Verkippung (a_2) und angepasstem Radius (a_1) eliminiert werden können. Zur Abgrenzung zu anderen Entwicklungen der Wellenfrontaberrationen wird (2.41) im Folgenden als *Seidel-Entwicklung* bezeichnet. Es finden sich zahlreiche Beispiele zu den einzelnen Aberrationen in Lehrbüchern der physikalischen (z. B. [20, 62]) und technischen Optik [61, 63].

2.3.2 Wellenoptische Betrachtung der Aberrationen

Für einen paraxialen, vollkohärenten Strahl bedeutet die oben beschriebene Situation, dass die Phase aus der Summe der Phasen von Referenzsphäre und Aberrationen besteht. Der Übergang zu einer wellenoptischen Betrachtung kann vollzogen werden, indem das Huygens-Fresnel-Prinzip auf die geometrische Wellenfront S angewendet wird [64]

$$u(P) = -\frac{i}{\lambda} \frac{Ae^{-ikR}}{R} \int_S dS \frac{e^{ik(s-\Phi)}}{s} \quad (2.42)$$

wobei P ein Punkt in der Nähe des Gaußschen Bildpunktes P^* ist, R der Radius der Referenzsphäre, A eine konstante Amplitude und s der Radius der Elementarwelle am Punkt P . Die Integration erstreckt sich über die Referenzsphäre in der Austrittspupille. Nun sei ein Koordinatensystem gegeben mit Ursprung bei P^* und die z -Achse gehe durch das Zentrum der Austrittspupille. In Bezug auf die Wellenfrontaberration bedeutet dies lediglich eine Änderung der Referenzsphäre. Der Winkel zwischen z - und optischer Achse sei klein. Der Punkt $P = (x, y, z)$ liege in der Nähe von P^* und $Q_R = (\xi, \eta, \zeta)$ sei ein Punkt auf der Referenzsphäre. In Fresnelscher Näherung (zur Integration über die Wellenfront siehe (8.8.1) in [20]) folgt das Integral über die Austrittspupille σ mit Fläche F

$$u(\mathbf{P}) = -\frac{iA}{\lambda R^2} e^{ikz} \iint_{\sigma} d\xi d\eta e^{ik\left[\Phi(P^*, \xi, \eta) - \frac{z}{2R^2}(\xi^2 + \eta^2) - \frac{1}{R}(\xi x + \eta y)\right]} \quad (2.43)$$

Der Bildpunkt wird durch einen Aberrationsterm in typischer Weise verzerrt, der durch die oben angegebene Fouriertransformierte bestimmt ist. Beispielsweise bewirkt ein Koma, dass der Bildpunkt einen „Schweif“ erhält.

Der *Strehl-Wert* D_s („Strehl“, „Definitionshelligkeit“) ist das Verhältnis der Intensitäten im aberrierten zum aberrationsfreien Fall am Gaußschen Bildpunkt [65, 66] und lautet mit $P = P^*$ und (2.43)

$$D_s = \frac{1}{F^2} \left| \iint_{\sigma} d\xi d\eta e^{ik\Phi(P^*, \xi, \eta)} \right|^2 \quad (2.44)$$

Aus Entwicklung der Exponentialfunktion unter dem Integral in zweiter Ordnung in Φ und Vergleich mit der Standardabweichung der Wellenfrontaberration folgt [20]

$$D_s \approx 1 - k^2 (\Delta\Phi)^2 \quad (2.45)$$

mit

$$\Delta\Phi = \overline{\Phi^2} - \overline{\Phi}^2 \quad \overline{\Phi^n} = \frac{\int_{\sigma} d^2\xi \Phi^n(\xi)}{\int_{\sigma} d^2\xi} \quad (2.46)$$

die *Maréchal-Approximation* an den Strehl-Wert für kleine Wellenfrontaberrationen gegenüber der Wellenlänge. Manche Autoren bezeichnen die Näherung $D_s = e^{-(k\Delta\Phi)^2}$ als Maréchal-Approximation. Zu Herleitung und Anwendbarkeit dieses Ausdrucks siehe [67]. Die genaue Definition von Strehl variiert in der Literatur und wird oft auf den Punkt höchster Intensität bezogen (Diffraktions-Fokus [20]), der im aberrierten Fall nicht P^* sein muss. Die hier verwendete Definition ist dann eine untere Grenze und beide Definitionen liefern die gleichen Werte im Grenzfall kleiner Aberrationen.

Nach dem *Maréchal-Kriterium* gilt ein optisches System als gut korrigiert (bezüglich der Aberrationen), wenn $\Delta\Phi \leq \lambda/14$ gilt [68]. Nach (2.45) gilt dann $D_s \geq 0.8$. Wichtige Größen zur Beurteilung einer Wellenfront sind die *Irregularität* der Wellenfront (wavefront peak-to-valley, w_{pv})

$$w_{pv} = \max_{\xi} [\Phi(\xi)] - \min_{\xi} [\Phi(\xi)] \quad (2.47)$$

und die *Wellenfrontrauigkeit* (wavefront root-mean-squared, w_{rms})

$$w_{rms} = \sqrt{\langle \Phi^2 \rangle - \langle \Phi \rangle^2} \quad \langle \Phi^n \rangle = \frac{\int d^2\xi I(\xi) \Phi^n(\xi)}{\int d^2\xi I(\xi)} \quad (2.48)$$

mit der Intensität $I(\xi, \eta)$ [19]. Das *Rayleigh-Kriterium* ist eine weitere Faustregel wonach eine Wellenfront dann gut korrigiert ist, wenn $w_{pv} \leq \lambda/4$. Ein Nachteil gegenüber dem Maréchal-Kriterium ist, dass der Strehl-Wert nicht für jeden Aberrationsterm, der das Rayleigh-Kriterium gerade erfüllt, identisch ist.

Zuletzt stellt sich die Frage, ob die Aberrationen, wie sie oben eingeführt wurden, auch bei partiell kohärenter Strahlung sinnvoll definiert sind. Für die Strahl aberrationen und die Aberrationen der geometrischen Wellenfront gilt dies, da im Rahmen der geometrischen Optik keine Interferenzen zwischen den Strahlen auftreten. Die maßgebende charakteristische Funktion hängt nur vom Brechzahlprofil des Raumes, durch den die Strahlung propagiert, ab. Die Wellenfront aberration kann bei partieller Kohärenz nicht wie oben beschrieben als Korrektur an die Phase einer komplexen Amplitude behandelt werden, dennoch kann man darunter ebenfalls Abweichungen der lokalen Ausbreitungsrichtung von einer gewünschten Referenzsphäre verstehen (siehe Abschnitt 1.3).

2.3.3 Polynomiaentwicklung der Wellenfront

Vielfach zeigen Laser ein annähernd kreisförmiges Strahlprofil oder kreisrunde Aperturen geben eine solches vor. Eine Potenzreihenentwicklung im Stil der Seidel aberrationen (2.41) in Polarkoordinaten mit $\xi = a\rho \cos\theta$ und $\eta = a\rho \sin\theta$ ($\rho \in [0, 1]$, $\theta \in [0, 2\pi]$) auf einer kreisförmigen Austrittspupille mit Radius a hängt nur von den Kombinationen x^*2 , ρ^2 und $x^* \rho \cos\theta$ ab. Ein Entwicklungsterm hat dann die Form

$$(x^*2)^l (\rho^2)^j (x^* \rho \cos\theta)^m \quad (2.49)$$

mit $l, j, m \in \mathbb{N}_0$ [20]. Mit $n = 2j + m$ ist die Ordnung 2ν eines solchen Terms $2l + m + n$ und die Entwicklung der Wellenfront aberration lautet

$$\Phi(x^*, \rho, \theta) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{2\nu} \sum_{\substack{m=0 \\ n-m \text{ gerade}}}^n \tilde{a}_{\nu nm} x^{*2\nu-n} \rho^n \cos^m \theta \quad (2.50)$$

Die Entwicklungsterme sind jedoch nicht orthogonal auf dem Einheitskreis. Die Entwicklung von Frits Zernike und Bernard Nijboer ist nun so organisiert, dass jeder Seidelterm höherer Ordnung mit Termen niedrigerer Ordnung kombiniert wird. Die so konstruierten Entwicklungsterme sind orthogonal zueinander.

Dazu verwendet man die *Zernikepolynome* [20]

$$V_{nm0}(\rho, \theta) = R_n^m(\rho) \cos(m\theta) \quad V_{nm1}(\rho, \theta) = R_n^m(\rho) \sin(m\theta) \quad (2.51)$$

mit Radialanteil $R_n^m(\rho)$

$$R_n^m(\rho) = \frac{1}{\left(\frac{n-m}{2}\right)! \rho^m} \left[\frac{d}{d(\rho^2)} \right]^{\frac{n-m}{2}} \left[(\rho^2)^{\frac{n+m}{2}} (\rho^2 - 1)^{\frac{n-m}{2}} \right] \quad (2.52)$$

($\rho \in [0, 1]$ und $\theta \in [0, 2\pi]$ wie oben). Die Indices sind ganze Zahlen mit $n \geq 0$ und $n \geq m$, $n - m$ ist gerade. Diese Bedingungen an die Indices stellen sicher, dass die Zernikepolynome tatsächlich Polynome in den kartesischen Koordinaten entsprechen. Die Orthogonalitätsrelation lautet

$$\int_0^1 \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\theta V_{nmk}(\rho, \theta) V_{n'm'k'}(\rho, \theta) = \frac{\pi}{2(n+1)} \delta_{ll'} \delta_{nn'} \delta_{kk'} \quad (2.53)$$

Die Polynome sind invariant unter beliebigen Drehungen der Ebene in dem Sinne, dass eine Linearkombination von Polynomen zu einem festen Wert von n und m eine solche Linearkombination bleibt, das relative Gewicht ändert sich im Allgemeinen. Die Indices geben die Symmetrien des Zernikepolynoms vor: Sie sind invariant (nun im strengen Sinne) unter Drehungen um den Winkel $2\pi/m$, und der Radialanteil ist eine gerade Funktion, wenn m gerade ist sowie eine ungerade Funktion, wenn m ungerade ist. Der Radialanteil ist ein Polynom in ρ mit der höchsten Ordnung n und der kleinsten Ordnung m .

Es gibt mehrere sinnvolle und gebräuchliche Indizierungen und Normierungen der Zernikepolynome. In dieser Arbeit sind die Polynome so normiert, dass für den Radialanteil $R_n^m(1) = 1$ gilt für alle n, m . Eine andere nützliche Normierung ist so gestaltet, dass das Quadrat eines Entwicklungskoeffizienten der Wellenfrontaberration (siehe unten) gerade dem Beitrag dieses Terms zu w_{rms} entspricht. Die Indizierung für n und m folgt in dieser Arbeit dem Lehrbuch [20]. Um Konsistenz mit den Ausgaben der LLG-Software „MrBeam“ [69] herzustellen, wurde lediglich für spätere Zwecke ein dritter Index eingeführt, der nach geraden (0) und ungeraden (1) Termen in der Winkelkoordinate unterscheidet.

Die Entwicklung der Wellenfrontaberration in Zernikepolynome lautet dann in der Meridionalebene [70, 64]

$$\Phi(x^*, \xi, \eta) = \sum_{v=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{2v} \sum_{\substack{m=0 \\ n-m \text{ gerade}}}^n a_{vnm} x^{*2v-n} R_n^m(\rho) \cos(m\theta) \quad (2.54)$$

Ein Entwicklungsterm zu den Indices v, n, m ist von Ordnung $2v$, enthält jedoch wie erwähnt auch Terme niedrigerer Ordnung. Jeder Aberrationsterm in Seidel-Form ist Summand in unendlich vielen Zernike-Termen. Falls die Entwicklung nach den primären Aberrationen abgebrochen wird, sind die Entwicklungskoeffizienten a'_{vnm} einfache Linearkombinationen der Koeffizienten a_{vnm} und folgen durch Vergleich der Gleichungen (2.50) und (2.54).

Nr.	Ordnung	n	m	Term	Bezeichnung
0	0	0	0	1	Piston
1	2	1	1	$\rho \cos \theta$	Tilt X
2	2	1	1	$\rho \sin \theta$	Tilt Y
3	2	2	0	$2\rho^2 - 1$	Defokus
4	4	2	2	$\rho^2 \cos(2\theta)$	Astigmatismus 0°
5	4	2	2	$\rho^2 \sin(2\theta)$	Astigmatismus 45°
6	4	3	1	$(3\rho^2 - 2)\rho \cos(\theta)$	Koma X
7	4	3	1	$(3\rho^2 - 2)\rho \sin(\theta)$	Koma Y
8	4	4	0	$6\rho^4 - 6\rho^2 + 1$	Sphärische Aberration

Tabelle 2.1: Übersicht über die ersten neun Zernikeentwicklungsterme. $\rho \in [0, 1]$ und $\theta \in [0, 2\pi]$ sind die Polarkoordinaten auf dem Einheitskreis.

Wie man sieht, können die vollständigen Entwicklungskoeffizienten der Wellenfrontaberration nicht aus einer einzelnen Wellenfrontmessung bestimmt werden, weil so keine Information über Abhängigkeit von der Bildpunktordinate x^* gewonnen werden kann. Beispielsweise sind Bildfeldwölbung und Defokus sowie Verzeichnung und Tilt nicht unterscheidbar. Außerdem sei die Lage des Bildpunktes nicht genau bekannt (man verlässt also auch die Meridionalebene), aber nahe der optischen Achse und unveränderlich für eine bestimmte Messung mit dem Hartmann-Sensor. Die Entwicklung der Wellenfront lautet

$$W(\rho, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{m=0 \\ n-m \text{ gerade}}}^n \left\{ A_{nm0} R_n^m(\rho) \cos(m\theta) + A_{nm1} R_n^m(\rho) \sin(m\theta) \right\} \quad (2.55)$$

Mit Wellenfrontaberration wird hier die Entwicklung abzüglich Piston, Tilt und Defokus bezeichnet (siehe Tabelle 2.1). Die Abhängigkeit von den Koordinaten des Gaußschen Bildpunktes geht in die Koeffizienten A_{nm0} bzw. A_{nm1} ein. Wie man sieht ist diese Form der Entwicklung im Gegensatz zu den vorangegangenen nicht nur für rotationssymmetrische Systeme geeignet. Die Entwicklung wird im Folgenden kurz als *Zernikeentwicklung* bezeichnet. Die ersten neun Entwicklungsterme sind explizit in Tabelle 2.1 aufgeführt, eine Liste der ersten 37 Polynome ist in Anhang A.2 aufgeführt. Die bereits erwähnte Vorzeichenkonvention, wonach eine weiter vorangeschrittene Wellenfront einer positiven Aberration entspricht, bedeutet, dass für eine konvergente Wellenfront $A_{020} > 0$ und $R < 0$ gilt.

Die Zernikeentwicklung kann offensichtlich nicht dazu verwendet werden, die Koeffizienten einer Seidelentwicklung zu bestimmen, da keine Information über die Abhängigkeit von den Gaußschen Bildpunktkoordinaten enthalten ist. Wenn die höhe-

Term Zernikeentwicklung	enthaltene Seidelaberrationen
Piston	Piston
Tilt X	Tilt 0°, Verzeichnung 0°
Tilt Y	Tilt 90°, Verzeichnung 90°
Defokus	Defokus, Bildfeldwölbung, Piston
Astigmatismus 0°	Astigmatismus 0°, Defokus, Bildfeldwölbung
Astigmatismus 45°	Astigmatismus 45°, Defokus, Bildfeldwölbung
Koma X	Koma 0°, Verzeichnung 0°, Tilt 0°
Koma Y	Koma 90°, Verzeichnung 90°, Tilt 90°
Sphärische Aberration	Sphärische Aberration, Defokus Bildfeldwölbung, Piston

Tabelle 2.2: Übersicht über die zu den Zernikeaberrationen beitragenden Seidelaberrationen bis Ordnung vier.

ren Ordnungen vernachlässigt werden, kann man jedoch analog zum beschriebenen Vorgehen eine vereinfachte Seidelentwicklung aufstellen [71]

$$\Phi(\rho, \theta) = W_{00} + W_{11}\rho \cos(\theta + \theta_{11}) + W_{20}\rho^2 + W_{40}\rho^4 + W_{31}\rho^3 \cos(\theta + \theta_{31}) + W_{22}\rho^2 \cos^2(\theta + \theta_{22}) \quad (2.56)$$

und die Koeffizienten W_{nm} sowie die Winkel θ_{nm} durch die ersten neun Zernikekoeffizienten (bis zur vierten Ordnung) ausdrücken. Die Indices n, m entsprechen den Potenzen von ρ und $\cos(\theta)$. Die Koeffizienten lassen sich durch Vergleich auf die Koeffizienten der Seidelentwicklung zurückführen, dabei werden Tilt und Verzeichnung ($W_{11} = a_2 x^* + b_5 x^{*3}$) sowie Defokus und Bildfeldwölbung ($W_{20} = a_1 + b_4 x^{*2}$) zusammengefasst. Da die Zernikeentwicklung nicht nur rotationssymmetrische Systeme beschreibt, kann im Allgemeinen kein gemeinsamer Winkel θ_{nm} für die Entwicklungsterme gefunden werden. Die Umrechnung ist explizit im Beitrag von James Wyant in „Applied Optics and Optical Engineering XI“ gegeben [71].

Da die Terme der Zernikeentwicklung (2.55) nicht einzelnen Ordnungen der Seidelentwicklung 2.41 zugeordnet werden können, stellt sich die Frage, wie die Terme sinnvoll geordnet werden können, bzw. an welchem Punkt eine Entwicklung abgebrochen werden kann. Bei den später beschriebenen Messungen hat sich die Ordnung aus [71] bewährt. Dies lässt sich folgendermaßen motivieren: wie zuvor argumentiert, ist der transversale Abstand des Gaußschen Bildpunktes bei allen hier beschriebenen Messungen klein gegen die Dimension der Austrittspupille. Die Terme werden also für die spezielle Wahl $l = 0$ in (2.49) geordnet. Unter der Ordnung eines Terms A_{nmk} wird dann $2l + m + n|_{l=0} = m + n$ verstanden. Die Tabelle 2.2 bietet einen Überblick, welche Seidelaberrationen zu einem Term der Zernikeentwicklung beitragen.

Der Strehl-Wert einer homogen ausgeleuchteten, kreisrunden Apertur berechnet sich nach (2.43) und unter Ausnutzung von (2.53) zu [64]

$$D_s = 1 - k^2 \sum_{\substack{n=2 \\ \text{ngerade}}}^{\infty} \frac{A_{n00}^2}{n+1} - \frac{k^2}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n \frac{A_{nm0}^2 + A_{nm1}^2}{n+1} \quad (2.57)$$

Der Strehl-Wert zeigt eine wichtige Eigenschaft der Zernike-Polynome: Um den Strehl-Wert zu maximieren muss unter den hier getroffenen Annahmen lediglich jeder Zernike-Koeffizient A_{nml} einzeln minimiert werden. Ein Ausbalancieren der Aberrationen gegeneinander ist nicht möglich aber auch nicht nötig [64]. Eine weitere nützliche Eigenschaft der Zernikeentwicklung ist, dass der Diffraktions-Fokus für einen einzelnen Zernike-Aberrationsterm gerade am Gaußschen Bildpunkt liegt [20].

3 Freie-Elektronen-Laser im Röntgen-Spektralbereich

Die Strahlung von Freie-Elektronen-Lasern zeigt besondere Eigenschaften, die sie von spontaner Undulatorstrahlung unterscheiden. In diesem Kapitel wird ihre Erzeugung kurz skizziert und die Spektralbereiche Extremes Ultraviolett und weiche Röntgenstrahlung werden beschrieben.

3.1 EUV und weiche Röntgenstrahlung

3.1.1 Einordnung in das elektromagnetische Spektrum

Die Spektralbereiche Vakuum-Ultraviolett-Strahlung (VUV), Extrem Ultraviolette Strahlung (EUV) und weiche Röntgenstrahlung (SXR) sind nicht scharf voneinander abgegrenzt. Als Richtschnur eignet sich die in Abbildung 3.1 gezeigte Einteilung [72]. Der tief-ultraviolette Spektralbereich (Deep Ultraviolett, DUV) geht bei etwa 190nm Wellenlänge, wenn die Absorption in Quarzglas stark zunimmt, in das VUV über. Einige Stoffe (MgF_2 , CaF_2) eignen sich auch bei 157nm (Wellenlänge F_2 -Laser) als Material für refraktive Optiken. Bei noch kürzeren Wellenlängen von $\lambda \lesssim 140\text{nm}$ nimmt die Absorption stark zu, sodass reflektive oder diffraktive optische Elemente eingesetzt werden. Von EUV spricht man im Bereich $\lambda = 5\text{nm} - 40\text{nm}$ (bzw. Photonenergie 30eV-250eV). EUV und die daran angrenzende weiche Röntgenstrahlung (SXR) von 250eV bis einigen keV sind durch hohe Absorption gekennzeichnet, da viele K- und L-Absorptionskanten leichter bis mittelschwerer Elemente in diesem Bereich liegen [72]. Harte Röntgenstrahlung (HXR, ab einigen keV) besitzt wieder eine höhere Penetrationsfähigkeit. Eine besondere Rolle im Bereich EUV und weiche Röntgenstrahlung nehmen die Wellenlänge 13.5nm, verwendet in der EUV-Lithographie [73], und das Wasserfenster zwischen den K-Kanten von Sauerstoff (2.3nm) und Kohlenstoff (4.4nm) ein [74], in dem biologische Proben in wässriger Lösung guten Absorptionskontrast bieten.

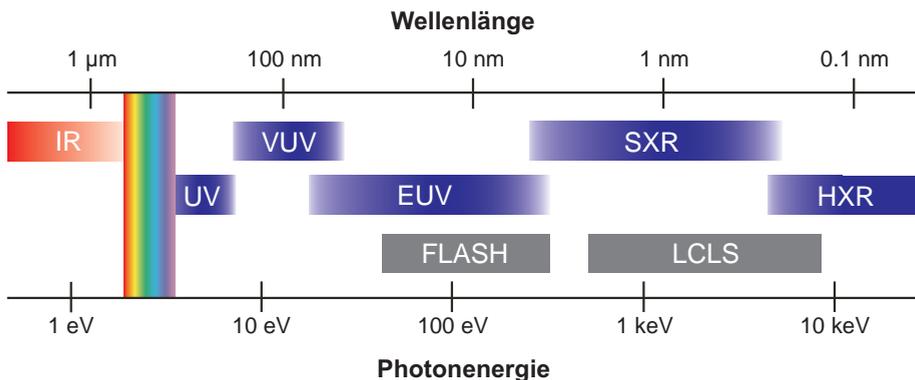


Abbildung 3.1: Elektromagnetisches Spektrum von Infrarot bis zur harten Röntgenstrahlung (Grafik nach [72]). Unten sind die von den Freie-Elektronen-Lasern FLASH und LCLS abgedeckten Spektralbereiche eingezeichnet.

Eine Besonderheit des Spektralbereichs EUV/SXR ist der Brechungsindex kleiner eins. Üblicherweise wird er in der Form

$$n = 1 - \delta + i\beta \quad (3.1)$$

geschrieben [72]. δ , β sind frequenzabhängig, positiv und klein gegen eins [72]. Durch den Brechungsindex kleiner eins kommt es zur *äußeren Totalreflexion* für Glanzwinkel (Winkel zur Spiegelfläche) unterhalb des kritischen Winkels $\theta_c \approx \sqrt{2\delta}$.

3.1.2 Spiegeloptiken

Gewöhnliche, metallische Spiegel weisen im EUV-Spektralbereich nur geringe Reflektivität auf. Die wichtigsten reflektiven Optiken in diesem Bereich sind Multilayer-Spiegel und Spiegel unter streifendem Einfall (kleine Glanzwinkel). Multilayer-Spiegel sind aus wechselnden Schichten eines optisch dichten und eines optisch dünnen Mediums aufgebaut. Die Dicke der Schichten ist so aufeinander abgestimmt, dass die an den Grenzflächen des dichten Materials reflektierten Teilstrahlen konstruktiv miteinander interferieren. Dadurch wird auch bei senkrechtem Einfall etwa 70% Reflektivität erreicht [75]. Eine typische Materialkombination für 13.5nm Wellenlänge ist Silizium (niedrige Ordnungszahl Z, optisch dünn) und Molybdän (großes Z, optisch dicht). Multilayerspiegel werden für eine bestimmte Wellenlänge und einen bestimmten Einfallswinkel konstruiert. An den Beamlines der Freie-Elektronen-Laser kommen daher Spiegel unter streifendem Einfall zum Einsatz, deren Reflektivität nur schwach von der Wellenlänge abhängt, solange die Bedingung für die Totalreflexion erfüllt ist.

Die Spiegel werden meist aus Silizium- oder Zerodur-Substrat gefertigt und mit einer Beschichtung versehen, die eine höhere Reflektivität als das Substrat aufweist und über ausreichende Strahlungsfestigkeit verfügt (z. B. C oder Ni bei 13.5nm, B₄C bei 1.5nm). Formfehler können anhand ihrer Auswirkungen auf die Abbildungseigenschaften der Optik in einen hohen, mittleren und niedrigen Raumfrequenzbereich eingeteilt werden. Hohe reduzieren die Reflektivität, mittlere den Kontrast und niedrige erzeugen Bildfehler. Die Aberration der Wellenfront, hervorgerufen durch eine Abweichung δh des Höhenprofils des Spiegels, ist unter Glanzwinkel θ (Winkel zur Spiegelfläche) gegeben durch $w = 2\delta h \sin(\theta)$, sodass für Spiegel unter streifendem Einfall größere Fehlertoleranzen gelten. Die Optik wird bei hohem Kohärenzgrad des Strahls durch eine komplexe Transferfunktion beschrieben [76], weil Interferenzen zwischen den an verschiedenen Positionen des Spiegels reflektierten Teilen des Strahls starken Einfluss auf das Intensitätsprofil haben können und durch Ray-Tracing nicht beschrieben werden [77]. In der Einfallsebene wird die Koordinate der Spiegeloberfläche ξ gemäß $x = \xi \sin(\theta)$ in die entsprechende transversale Koordinate x in einer Ebene senkrecht zur optischen Achse transformiert. Dadurch werden die Raumfrequenzen in der Einfallsebene des Spiegels zu höheren Frequenzen in der Wellenfront transformiert, mit den entsprechenden Auswirkungen auf das Strahlprofil (siehe Abbildung 7.2) [77].

Ellipsoidspiegel bilden eine Punktlichtquelle, die sich in einem der Brennpunkte befindet, aberrationsfrei auf den anderen Brennpunkt ab. Das Ellipsoid kann lokal durch einen einfacher zu fertigenden Toroidspiegel mit identischen Krümmungsradien ap-

proximiert werden, wodurch jedoch Bildfehler entstehen [78]. Die Radien berechnen sich aus den Coddington Gleichungen [79]

$$\frac{1}{b} + \frac{1}{g} = \frac{2 \cos \theta}{r_m} \quad \frac{1}{b} + \frac{1}{g} = \frac{2}{r_s \cos \theta} \quad (3.2)$$

wobei g der Abstand der Quelle vom Spiegel ist, b der Abstand des Bildes, r_m der kleine und r_s der große Krümmungsradius.

Kirkpatrick-Baez (KB)- Spiegel [80] bestehen aus zwei senkrecht zueinander ausgerichteten Planellipsen, deren Brennebenen zusammenfallen. Weil die Spiegel in nur einer Richtung gekrümmt sind, lassen sich vergleichsweise einfach variable Brennweiten realisieren.

3.1.3 Wellenfrontmessung im EUV- und Röntgen-Spektralbereich

Im Röntgen-Spektralbereich wurden bereits Wellenfrontmessungen durch Hartmann-Tests, Rekonstruktion der Wignerfunktion, Interferometrie und iterative Phasenrekonstruktion (Phase Retrieval) demonstriert. Der *Hartmann-Test* wird in Kapitel 4 ausführlich beschrieben und zeichnet sich vor allem durch Einzelpuls-Auflösung und sehr niedrige Anforderungen an die Kohärenz des Strahls aus. Ein Hartmann-Sensor kann ohne Veränderungen der Konstruktion über einen breiten Spektralbereich eingesetzt werden. Die Rekonstruktion der Wignerfunktion wird in Abschnitt 6.3 näher beschrieben und wurde bereits für weiche Undulatorstrahlung [81, 35] und FEL [36] demonstriert.

Die wichtigsten interferometrischen Verfahren sind das Point Diffraction Interferometer, dessen Variante Phase-Shifting Point Diffraction Interferometer und das Talbot-Interferometer. Das *Point Diffraction Interferometer* (PDI) besteht aus einer semitransparenten Membran mit einer kleinen Lochblende. Der Strahl wird auf die Membran fokussiert und leuchtet die Lochblende aus, die dabei eine sphärische Welle erzeugt [82]. Die Wellenfront des Strahls wird aus dem Interferenzmuster im Fernfeld bestimmt. Gute Ergebnisse werden nur bei vergleichbarer Intensität der Teilstrahlen und kleinem Durchmesser der Lochblende erzielt. Die Intensität des Referenzstrahls ist beim *Phase-Shifting Point Diffraction Interferometer* (PSPDI) um einige Größenordnungen höher als beim PDI [83]. Dazu wird der Strahl mit einem Phasengitter aufgeteilt und eine Ordnung auf die Lochblende fokussiert, die andere daran vorbei geführt. Schließlich werden die Teilstrahlen im Fernfeld zur Interferenz gebracht. Durch laterales Versetzen des Gitters werden mehrere Messungen bei unterschiedlicher relativer Phase zwischen den Ordnungen durchgeführt, die eine genauere Auswertung der Interferogramme ermöglichen. Es wird die hohe Auflösung $0.5\text{-}1\text{\AA}$ (w_{rms}) erreicht [84]. PDI und PSPDI werden im Bereich weicher Röntgenstrahlung eingesetzt, da die Erzeugung einer geeigneten Referenzwelle für harte Strahlung schwierig ist. Die Verfahren erreichen nur für divergierende Strahlen eine gute Auflösung, im Idealfall haben die Wellenfront der Referenz und des Strahls den gleichen Krümmungsradius. Daher werden beide Techniken in erster Linie zur Charakterisierung von Optiken eingesetzt. Diese sollte bereits teilweise korrigiert sein, damit ausreichende Intensität auf die Lochblende trifft.

Das *Talbot-Interferometer* (auch: Grating-Interferometer) beruht auf der Selbstabbildung eines periodischen Gitters (Talbot-Effekt [85]) mit Gitterabstand d und bei der Wellenlänge λ in periodisch wiederkehrenden Ebenen bei Vielfachen des Abstandes $L = 2d^2/\lambda$ [86, 87]. Aus den Verzerrungen der Abbildung wird die Wellenfront berechnet, aus der Sichtbarkeit der Kohärenzgrad bestimmt [88, 89]. Dabei kann die Wellenfront einzelner Pulse bestimmt werden, eine vollständige Bestimmung des Kohärenzgrades verlangt jedoch mehrere Messungen bei unterschiedlichen Abständen zwischen Talbot-Gitter und Detektor. Es wurde eine sehr hohe Auflösung für w_{pv} von etwa 1pm berichtet [90]. Das Talbot-Interferometer ist besonders für harte Röntgenstrahlung geeignet, weil Phasengitter eingesetzt werden können.

Die kohärente Röntgenabbildung (Coherent Diffractive X-Ray Imaging, CDXI) beruht auf der Rekonstruktion eines Objekts durch iterative Berechnung aus dem Beugungsbild im Fernfeld (Fraunhofer-Beugung) [91] oder Nahfeld (Fresnel-Beugung) [92] und zusätzlichen Randbedingungen in der Ebene des Objekts, die je nach Algorithmus variieren können. Es wird dabei eine idealisierte Beleuchtungsfunktion angenommen. Die *Ptychographie* vereint die Raster-Transmissions-Röntgenmikroskopie (Scanning Transmission X-Ray Microscopy, STXM) und CDXI, indem an jedem Rasterpunkt ein vollständiges Beugungsbild im Fernfeld aufgenommen wird [93]. Eine kürzlich demonstrierte Verbesserung ermöglicht es, zusätzlich die Beleuchtungsfunktion zu rekonstruieren [94]. Der fokussierte Strahl eines Röntgenmikroskops [95] (European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Beamline ID13) wurde auf diese Weise charakterisiert [96]. Verglichen mit anderen Verfahren zur Messung der Wellenfront wurde eine sehr hohe laterale Auflösung von unter 50nm erzielt, wobei eine große Zahl einzelner Röntgenpulse in die Rekonstruktion einbezogen wurde.

Genauigkeit und Zuverlässigkeit der iterativen Wellenfrontbestimmung können erhöht werden, indem Strahlprofile aus mehreren Ebenen in die Rekonstruktion einbezogen werden [97]. Dieses Verfahren wurde am Synchrotron Spring-8 bei harter Röntgenstrahlung zur Regelung adaptiver Spiegel eingesetzt und es wurde eine Genauigkeit von unter einem Nanometer w_{pv} erreicht [98, 99, 100]. Das Verfahren geht, wie auch die Ptychographie, von einem vollkohärenten Strahl aus.

3.2 Undulatorstrahlung

Undulatoren (periodische, lineare Anordnungen von Dipolmagneten abwechselnder Polarität [101]) erzeugen in der Mitte zwischen den Polen ein näherungsweise harmonisches \mathbf{B} -Feld [102]

$$\mathbf{B} = -B_0 \sin(k_u z) \mathbf{e}_y \quad (3.3)$$

mit $k_u = 2\pi/\lambda_u$, Undulatorperiode λ_u , Richtung des Elektronenstrahls z , Einheitsvektor \mathbf{e}_y . Undulatorstrahlung wird an Synchrotronstrahlquellen erzeugt, indem ein relativistischer Elektronenstrahl der Geschwindigkeit v im Undulator periodisch abgelenkt wird und dort näherungsweise der harmonischen Trajektorie [102]

$$x(z) = \frac{K}{\beta\gamma k_u} \sin(k_u z) \quad (3.4)$$

folgt mit der transversalen Geschwindigkeitskomponente

$$v_x(z) = \frac{Kc}{\gamma} \cos(k_u z) \quad (3.5)$$

sowie der Vakuumlichtgeschwindigkeit c , dem relativistischen Lorentzfaktor γ , $\beta = v/c$ und dem Undulatorparameter $K = eB_0/m_e c k_u$. m_e bezeichnet die Ruhemasse des Elektrons. Die Elektronen strahlen Bremsstrahlung in einen schmalen, nach vorn gerichteten Kegel ab. Sie ist in x -Richtung polarisiert. Die gesamte abgestrahlte Leistung entspricht der abgestrahlten Leistung eines Elektrons multipliziert mit dem Elektronenfluss I/e (inkohärente Superposition). Abstrahlcharakteristik und Wellenlänge folgen aus der relativistischen Energie der Elektronen: Im mit der mittleren longitudinalen Geschwindigkeit \bar{v}_z der Elektronen in z -Richtung mitbewegten Bezugssystem der Elektronen strahlen sie näherungsweise in Form eines Hertzchen Dipols ab, wobei die Wellenlänge der um einen Faktor γ lorentzkontrahierten Undulatorperiode entspricht. Durch Transformation in das Laborsystem folgt nun zum einen die konische Abstrahlcharakteristik mit Öffnungswinkel $\theta \sim 1/\gamma$ der Undulatorstrahlung und zum anderen die Kontraktion der Wellenlänge um einen weiteren Faktor γ . Beachtet wird außerdem die Abhängigkeit des relativistischen Dopplereffekts vom Abstrahlwinkel θ und die Reduzierung der z -Komponente der Geschwindigkeit der Elektronen durch die transversale Oszillation, ausgedrückt durch den effektiven axialen Lorentzfaktor [72]

$$\gamma^* = \frac{\gamma}{\sqrt{1 + \frac{K^2}{2}}} \quad (3.6)$$

und es folgt die Undulatorgleichung

$$\lambda = \frac{\lambda_u}{2\gamma^{*2}} (1 + \gamma^{*2}\theta^2) \quad (3.7)$$

Für einen Undulator gilt $K < 1$, bei größeren Werten von K spricht man von einem Wiggler.

Die Trajektorie der Elektronen im mit \bar{v}_z mitbewegten Bezugssystem weicht wegen der longitudinalen Oszillationen um die mittlere Geschwindigkeit vom idealen Hertzchen Dipol ab und beschreibt eine Acht. Dadurch erhält das Spektrum sowohl gerade als auch ungerade harmonische Anteile der Ordnung n mit der Wellenlänge $\lambda_n = \lambda/n$. Die ungeraden Harmonischen strahlen wie die Fundamentale in einen schmalen, vorwärts gerichteten Kegel ab. Die geraden Harmonischen strahlen in einen Hohlkegel ab und verschwinden auf der optischen Achse. Die relative Breite der Acht und die Intensität der höheren Harmonischen nehmen mit dem Undulatorparameter zu [72].

Die abgestrahlte Wellenlänge kann über die Energie des Elektronenstrahls oder den Undulatorparameter K (Abstand der Magnetpole, „Gap“) variiert werden. Im Falle der unten beschriebenen SASE FEL wird derzeit die erste Möglichkeit wegen der höheren mechanischen Präzision bevorzugt [23]. Die natürliche spektrale Bandbreite $\Delta\nu/\bar{\nu}$ ist $1/N$, mit der Anzahl N der Undulatorperioden, d.h. der Anzahl der Schwingungen des

Hertzschen Dipols im mitbewegten Bezugssystem. Vergleich mit der Undulatorgleichung zeigt, dass diese in einem zentralen Strahlungskegel mit der Divergenz

$$\theta_c = \frac{2}{\gamma^* \sqrt{N}} \quad (3.8)$$

erreicht wird.

Die wichtigste Größe zur Charakterisierung einer Synchrotronquelle ist die Brillanz, definiert als

$$\text{Brillanz} = \frac{\text{Photonen}|_{0,1\% \text{ Bandbreite}}}{\text{Zeit} \cdot \text{Quellfläche} \cdot \text{Divergenz}} \quad (3.9)$$

Die Brillanz bestimmt, wie M^2 in anderen Bereichen der Optik, den maximal zur Verfügung stehenden Fluss an Photonen. Eine ausführliche Einführung in die Erzeugung von Synchrotronstrahlung findet sich beispielsweise in den Lehrbüchern [72, 103].

3.3 Freie-Elektronen-Laser

Das Freie-Elektronen-Laser (FEL)-Konzept der Strahlungsverstärkung wurde 1960, noch bevor dieser Begriff geprägt wurde, in einer Art Wanderfeldröhre („Travelling Wave Tube“, TWT) mit Undulatoranordnung (genannt „Ubitron“) umgesetzt, wenn auch fernab des sichtbaren Spektrums [104, 105]. TWT sind Verstärkerröhren für Mikrowellen- und Radarsignale, durch die der Elektronenstrahl und das Radio Frequency (RF)-Signal mit annähernd gleicher Geschwindigkeit propagieren. In den siebziger Jahren veröffentlichte J. Madey theoretische Grundlagen der Strahlungsverstärkung, wie den Verstärkungsfaktor („Gain“) [106] und prägte den Begriff Freie-Elektronen-Laser [107]. Trotz der üblichen Bezeichnung als Laser können FEL wie FLASH oder LCLS vollständig im Rahmen der klassischen Elektrodynamik beschrieben werden [108]. Quanteneffekte können vernachlässigt werden, solange der Energieverlust eines Elektrons bei Aussenden eines Photons klein ist gegen die Verstärkungsbandbreite des FEL und das Quantenrauschen der Undulatorstrahlung vernachlässigt werden kann gegenüber der Breite der Energieverteilung der Elektronen [109, 110]. Da die Strahlungserzeugung nicht auf diskreten Energieniveaus beruht, sind FEL voll durchstimmbar und besonders geeignet um Spektralbereiche zu erschließen, für die keine anderen bzw. nur leistungsschwache Laser existieren.

1976 wurde erstmals ein Laser im mittleren Infrarot durch einen FEL verstärkt [111] und ein Jahr später der erste FEL eigenständig, d.h. gestartet durch spontane Undulatorstrahlung, im gleichen Spektralbereich betrieben [112]. Beide Systeme verwendeten einen Resonator, man spricht wegen der geringen Verstärkung von einigen Prozent pro Umlauf von einem *Low-Gain-FEL*. Im Gegensatz dazu passiert der Strahl den Undulator in einem *High-Gain-FEL* nur ein Mal und erfährt die gesamte Verstärkung während dieser einen Passage. Die anfängliche Strahlung kann entweder von außen in den Undulator eingekoppelt werden, dann spricht man von Seeding, oder die spontane Undulatorstrahlung kann durch den SASE-Prozess („Self-Amplified Spontaneous Emission“) verstärkt werden. Die derzeit betriebenen Freie-Elektronen-Laser im EUV- und Röntgen-Spektralbereich sind High-Gain FEL, da die Anforderungen

an die Resonatoroptiken eines Low-Gain-FEL eine hohe technische Hürde darstellen [113, 114, 115]. Seeding kann vor allem die zeitliche Kohärenz verbessern und wurde bereits bei 160nm Wellenlänge an SCSS (Spring-8 Compact SASE Source) mit der fünften Harmonischen eines Titan-Saphir Lasers (800nm, $10^{-5} - 10^{-6}$ Konversionseffizienz) demonstriert [116]. Das Self-Seeding [117], bei dem ein FEL-Puls in einem ersten Undulator erzeugt, monochromatisiert und als Seed in einem zweiten Undulator verwendet wird, ist vor allem für harte Röntgenstrahlung interessant, weil die Konversionseffizienz der Erzeugung hoher Harmonischer mit zunehmender Ordnung der Harmonischen abnimmt. Die folgende Darstellung konzentriert sich auf SASE FEL, zu denen FLASH und LCLS gehören. Eine umfassende Darstellung aller FEL-Typen bieten z. B. [102, 118].

3.3.1 Grundlagen der Strahlungserzeugung in FEL

Wie Synchrotronstrahlquellen erzeugen Freie-Elektronen-Laser (FEL) Strahlung durch Propagation eines relativistischen Elektronenstrahls durch einen Undulator, jedoch wird zusätzlich die Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit einem elektromagnetischen Feld gezielt ausgenutzt. Der Elektronenstrahl kann auf seiner harmonischen Trajektorie (3.4) über die Transversalkomponente der Geschwindigkeit v_x (3.5) Energie W mit einer kollinear propagierenden Transversal-Elektromagnetischen Welle (TEM) austauschen [102]

$$\frac{dW}{dt} = -e v_x(t) E_x(t) = -e \frac{cK}{\gamma} \cos(k_u z) E_0 \cos(k_l z - \omega_l t + \psi_0) \quad (3.10)$$

$$\equiv -\frac{ecKE_0}{2\gamma} \cos\psi - \frac{ecKE_0}{2\gamma} \cos\chi \quad (3.11)$$

mit elektrischem Feld E_x , Wellenvektor k_l und Kreisfrequenz ω_l der TEM und einer konstanten Phase ψ_0 . Die Amplitude des elektrischen Feldes wird hier als konstant angenommen. Die Größe

$$\psi = (k_l + k_u)z - \omega_l t + \psi_0 \quad (3.12)$$

wird meist als ponderomotive Phase bezeichnet, der $\cos\chi$ -Term trägt im Mittel nicht zum Energietransfer bei. Zeigen E_x und v_x in die gleiche Richtung, wird Energie von den Elektronen auf das elektromagnetische Feld übertragen. Der Energietransfer zeigt keine Vorzeichenwechsel, falls $\psi(t) = \text{const}$ bzw. das Elektron pro Undulatorperiode gegenüber der TEM gerade um eine Resonanzwellenlänge zurückfällt (Grafik 3.2). Diese Bedingung ist gerade für die Resonanzwellenlänge des Undulators erfüllt.

Die Bewegungsgleichungen des Elektrons können elegant im (ψ, η) -Phasenraum der ponderomotiven Phase und der relativen Abweichung der Elektronenergie $W = \gamma m_e c^2$ bzw. des Lorentzfaktors γ vom Resonanzwert,

$$\eta = \frac{W - W_r}{W_r} = \frac{\gamma - \gamma_r}{\gamma_r} \quad |\eta| \ll 1 \quad (3.13)$$

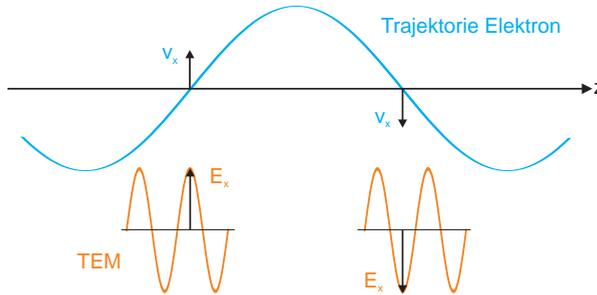


Abbildung 3.2: Energieübertrag vom Elektron auf eine TEM Welle. Je Undulatorperiode schreitet die Lichtwelle um eine Resonanzwellenlänge gegenüber der Elektron-Trajektorie voran (Grafik nach [102]).

bei der die Wellenlänge der spontanen Undulatorstrahlung und der äußeren TEM identisch sind

$$\lambda_l = \frac{\lambda_u}{2\gamma_r} \left(1 + \frac{K^2}{2}\right) \rightarrow \gamma_r = \sqrt{\frac{\lambda_u}{2\lambda_l} \left(1 + \frac{K^2}{2}\right)} \quad (3.14)$$

formuliert werden [102]. Sie werden ihrer mathematischen Form entsprechend, die derjenigen eines mechanischen Pendels entspricht, als Pendelgleichungen bezeichnet und folgen aus zeitlicher Ableitung der ponderomotiven Phase (3.12) und von η (3.10,3.13)

$$\frac{d\psi}{dt} = 2k_u c \eta \quad (3.15)$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{eE_0 K}{2m_e c \gamma_r^2} \cos(\psi) \quad (3.16)$$

Wie im Falle einfacher Undulatorstrahlung werden auch höhere Harmonische erzeugt. Der Anteil der zweiten Harmonischen ist im Idealfall gegenüber der dritten Harmonischen um mehr als eine Größenordnung unterdrückt [1, 119]. Der Anteil der zweiten Harmonischen hängt jedoch auch von weiteren Parametern des Elektronenstrahls ab [119] und es wurde an FLASH bereits ein annähernd gleiches Verhältnis von zweiter und dritter Harmonischer gemessen [120].

Zu Beginn des Undulators sei die Energie der Elektronen gleichverteilt in ψ . Ist die Energie der Elektronen gerade die Resonanzenergie ($\eta = 0$), heben sich die Energiegewinne und -verluste der einzelnen Elektronen auf und es findet in der Summe kein Energietransfer statt. Für $\eta > 0$ („Detuning“) wird Energie aus dem Elektronenstrahl auf das EM Feld übertragen.

3.3.2 High-Gain SASE FEL

3.3.2.1 Kohärenz und Microbunching

Während die Kohärenz von Low-Gain-FEL-Strahlung erst durch den Resonator zustan-

de kommt, gelingt dies in einem High-Gain-FEL durch Strukturierung des Elektronenpakets. Durch Konzentration der Elektronen in Bereichen, die longitudinal deutlich kürzer sind als die Undulator-Resonanzwellenlänge, strahlen diese im Idealfall wie ein einzelnes, hoch geladenes Teilchen transversal kohärente Strahlung ab. Diese Möglichkeit erwähnt H. Motz bereits 1951 [101], jedoch ohne eine technische Umsetzung neben der (nur für große Wellenlängen realisierbaren) Kompression des gesamten Elektronenpakets zu präsentieren. In FEL wird diese Strukturierung des Elektronenstrahls durch Wechselwirkung mit der eigenen spontanen Undulatorstrahlung erreicht. Elektronen, die Energie gewinnen, bewegen sich auf Trajektorien mit kleinerer transversaler Amplitude als Elektronen, die Energie an das EM Feld abgeben. Dadurch wird die longitudinale Geschwindigkeit moduliert und schließlich konzentriert sich die Elektronendichte auf Bereiche nahe des maximalen Energietransfers, die deutlich kürzer sind als die abgestrahlte Wellenlänge („Microbunching“) [121, 122]. Die Gesamtintensität berechnet sich aus dem Quadrat der summierten Amplitude (kohärente Superposition) und der Verstärkungsfaktor gegenüber einfacher Undulatorstrahlung kann durch die Anzahl der Elektronen in der Länge, die dem gesamten Phasenschlupf über den Undulator entspricht, abgeschätzt werden [123].

Die am Anfang des Undulators erzeugte Undulatorstrahlung strukturiert das Elektronenpaket im anschließenden Abschnitt. Da die Undulatorstrahlung der einzelnen Elektronen jedoch unkorreliert ist, entsteht nicht unmittelbar eine einheitliche Modulation der Elektronendichte. Bevor das Elektronenpaket in den Undulator eintritt, bestehen bereits zufällige Fluktuationen des Stroms in einem breiten Frequenzbereich. Der SASE-Prozess wirkt nun wie ein schmalbandiger Verstärker um die Resonanzfrequenz, sodass die Modulation mit einheitlicher Frequenz entsteht [102]. Man spricht von einer kollektiven Instabilität des Undulator-Elektronen-Feld-Systems [122]. Dabei wird nach Eintritt des Elektronenstrahls in den Undulator zunächst eine große Anzahl transversaler Moden angeregt, die jedoch während der Propagation durch den Undulator abnimmt, da die Grundmode am meisten verstärkt wird [124, 125].

In den ersten 2-3 Verstärkungslängen l_g (3.17) eines SASE FEL entsteht spontane Undulatorstrahlung. Es schließt sich das *lineare Regime* an, in dem die Leistung P des eingehenden elektromagnetischen Feldes linear verstärkt wird und exponentiell mit der Propagationsstrecke durch den Undulator anwächst

$$P \propto \exp(-z/l_g) \quad (3.17)$$

l_g ist die Verstärkungslänge der Leistung („Power Gain Length“). Im *gesättigten Regime*, bei der Sättigungslänge l_s ($l_s \sim 10l_g$ für Röntgen-FEL [123]), wird die maximale, nahezu vollständige Modulation der Elektronendichte erreicht. Im *tiefgesättigten Regime* ($\sim 15l_g$) werden Elektronen durch die starken Felder so stark beschleunigt oder abgebremst, dass die Microbunches eine Unterstruktur entwickeln [102, 126]. Zudem verlieren die Elektronen durch Strahlung Energie, sodass die Phasenbeziehung zwischen der Elektronentrajektorie und der TEM schrittweise verloren geht [127]. Diesem Effekt kann durch Variation des Undulatorparameters („Tapering“) entgegengewirkt werden. Im tiefgesättigten Regime nehmen transversale und longitudinale Kohärenz sowie Brillanz ab, die gesamte abgestrahlte Leistung kann jedoch weiter anwachsen [123].

Im linearen Regime übertragen sich die Gauß-verteilten Schwankungen des Stroms im Elektronenpaket auf die komplexe Amplitude des FEL-Strahls. Die instantane Intensität I ist dann als Quadrat der Amplitude exponential-verteilt [128]

$$p(I) = \frac{1}{\langle I \rangle} \exp \left[-\frac{I}{\langle I \rangle} \right] \quad (3.18)$$

und die Pulsenergie E wird durch die Gammaverteilung

$$p(E) = \frac{M^M}{\Gamma(M)} \left(\frac{E}{\langle E \rangle} \right)^{M-1} \frac{1}{\langle E \rangle} \exp \left[-M \frac{E}{\langle E \rangle} \right] \quad (3.19)$$

beschrieben. $\Gamma(M)$ ist die Gammafunktion und M ist der Kehrwert der normierten Varianz der Pulsenergieverteilung $\sigma_n^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle / \langle E \rangle^2$.

3.3.2.2 Das eindimensionale Modell und 3D-Effekte

Die Näherung eines unveränderlichen, äußeren TEM Feldes ist für High-Gain-FEL wegen der hohen Verstärkung nicht gerechtfertigt. Die gekoppelten Pendelgleichungen der Elektronen müssen simultan mit der inhomogenen Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes gelöst werden. Wegen der hohen Konzentration der Elektronendichte können Raumladungseffekte im Gegensatz zur Low-Gain-Theorie nicht vernachlässigt werden.

Im *eindimensionalen, stationären Modell* wird eine homogene Elektronendichte senkrecht zur Undulatorachse und ein longitudinal unendlich ausgedehntes Elektronenpaket angenommen. In einigen Fällen kann das Modell analytisch gelöst werden (siehe z. B. [108]).

Die wichtigsten Eigenschaften eines SASE FEL im linearen Regime lassen sich in diesem Modell durch den dimensionslosen FEL-Parameter [122]

$$\rho = \left[\frac{I}{I_A} \frac{A_{JJ}^2 K^2 \lambda_w^2}{32\pi^2 \gamma^2 \sigma_\perp^2} \right]^{1/3} \quad (3.20)$$

ausdrücken, mit den Größen: Strom des Elektronenstrahls I , Alfvén Strom $I_A = 17\text{kA}$, Standardabweichung der transversalen Elektronenverteilung σ_\perp , Undulatorperiode λ_w , Undulatorparameter K , Kopplungsparameter $A_{JJ} = J_0(Q) - J_1(Q)$ ($Q = K^2 / [2(1 + K^2)]$), J_0 und J_1 sind Bessel-Funktionen der ersten Art), relativistischer Faktor γ . Der FEL-Parameter ist proportional zur Anzahl der Undulatorperioden je Verstärkungslänge und entspricht dem Verhältnis von abgestrahlter Leistung P_{sat} zur Energie des Elektronenstrahls $P_b = \gamma mc^2 I / e$. Abschätzungen der wichtigsten SASE FEL Eigenschaften sind in Anhang A.3 aufgelistet.

Offenbar kann das eindimensionale Modell nur bei vernachlässigbaren Verlusten durch Beugung des EM Feldes im Undulator angewendet werden. Ausgedrückt durch die Standardabweichung der Elektronendichte σ_\perp , die Verstärkungslänge l_g und die Wellenlänge der FEL-Strahlung λ_l gilt die Faustregel $\sigma_\perp \ll \sqrt{\lambda_l l_g}$ [102]. Für FLASH ist diese Bedingung nicht erfüllt und Korrekturen durch 3D-Effekte müssen berücksichtigt werden. Im linearen Regime bietet das eindimensionale Modell dennoch eine gute Abschätzung [29].

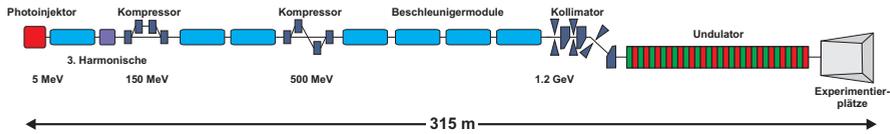


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des Freie-Elektronen-Lasers in Hamburg (nicht maßstäblich, Grafik nach [133]).

Einige elementare Effekte wie die transversale Kohärenz müssen in der vollständigen, dreidimensionalen Theorie beschrieben werden. Hierfür wurden Simulations-Codes entwickelt, z. B. GENESIS [129] und FAST [130].

3.4 Der Freie-Elektronen-Laser in Hamburg

Der Freie-Elektronen-Laser in Hamburg besteht im Wesentlichen aus einer Elektronenquelle, einem Linearbeschleuniger, Kompressoren und dem Undulator und erstreckt sich über 315m von der Elektronenquelle bis zu den Experimentierstationen. Eine schematische Übersicht der Anlage ist in Abbildung 3.3 gezeigt, wichtige Parameter sind in Tabelle 3.2 aufgelistet.

Der Photoinjektor besteht aus einer Photokathode [131, 132] in einer RF-Kavität. Das RF-Feld dient der schnellen Beschleunigung auf relativistische Energien, um einer Verbreiterung des Strahls durch Raumladungseffekte entgegenzuwirken [133].

An den Photoinjektor schließt sich der supraleitende Beschleuniger an, bestehend aus sechs (ab Anfang 2010: sieben) Beschleunigermodulen von 12.2m Länge. Jedes Modul enthält acht mit flüssigem Helium gekühlte Kavitäten aus reinem Niob mit Resonanzfrequenz 1.3GHz aus je neun Zellen [134]. Prinzipiell können die Kavitäten kontinuierlich betrieben werden. Die typische Zeitstruktur des FLASH-Strahls, mit Pulszügen von bis zu 800 μ s Dauer (Frequenz der Einzelpulse 1MHz, Pulsdauer 10-50fs), die mit einer Frequenz von 5Hz (seit Februar 2010: 10Hz) erzeugt werden, wurde gewählt um die Wärme abführen zu können [135]. Im Nutzerbetrieb ist die Zahl der Einzelpulse pro Pulszug typischerweise 1-30. Einzelne Pulszüge können ausgewählt werden, indem der Strahlengang blockiert und nur für kurze Zeit freigegeben wird („Fast Shutter“).

Durch longitudinale Kompression der Elektronenpakete in zwei magnetischen Schikanen wird der Strom von 70A auf 2kA erhöht [136]. Etwa 10% der Elektronen werden in ca. 50fs zu Beginn des Elektronenpakets konzentriert. Die Strahlung der nachfolgenden Elektronen trägt wegen des geringen Stroms nicht zum FEL-Puls bei [133]. Die Varianz der Elektronenenergie trägt etwa zur Hälfte zur spektralen Bandbreite von ca. 1% der FEL-Pulse bei und verringert den erreichten FEL Gain [1].

Am Ende des Beschleunigers wird der Strahl kollimiert und tritt in den Undulator aus sechs Segmenten à 4.5m Länge ein (NdFeB, festes Gap) [23, 135]. Zwischen den Segmenten wird der Strahl mit Quadrupolmagneten fokussiert. Der Strahl wird vom Undulator über evakuierete Strahlengänge in fünf Zweige („Beamlines“) zu den Experimentierplätzen geführt. An den Beamlines BL1, BL2, BL3 steht der FEL-Strahl mit voller spektraler Bandbreite zur Verfügung und PG1, PG2 liefern monochroma-

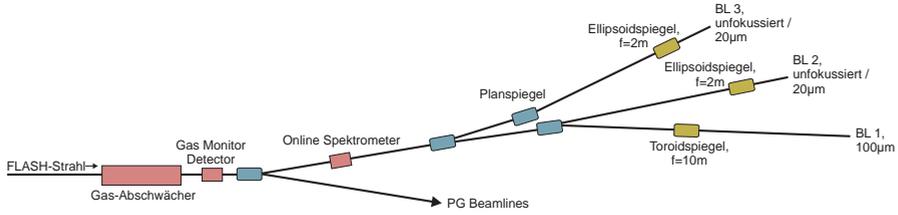


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der nicht-monochromatisierten Beamlines des Freie-Elektronen-Lasers FLASH ([11]).

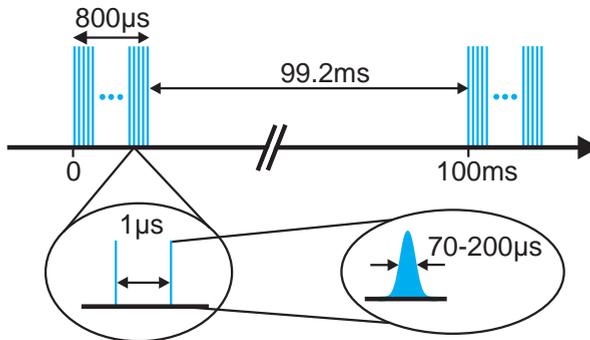


Abbildung 3.5: Zeitstruktur der FEL-Pulse an FLASH. Pulzzüge mit einer Repetitionsrate 10Hz beinhalten bis zu 800 Einzelpulse mit 1MHz. (Grafik nach [135]).

	BL1	BL2	BL3
Fokussierspiegel	Toroid (10m)	Ellipsoid (2m) / unfokussiert	Ellipsoid (2m) / unfokussiert
ØFokus (FWHM) ca.	100µm	20µm	20µm
Undulatorende - Fokus	76m	73m	72.2m
Optische Elemente	4	3 / 2	5 / 4
letzter Flansch - Fokus	1281mm	636mm	637mm

Tabelle 3.1: Eigenschaften der nicht-monochromatisierten FLASH-Beamlines [11].

tisierte Röntgenstrahlung (Gittermonochromator) zum Experimentierplatz [137]. Für Terahertz-Strahlung existiert eine weitere Beamline mit eigenem Undulator [138]. Alle Fokussier- und Ablenkspiegel stehen unter streifendem Einfall von $2^\circ - 3^\circ$ im Strahl und sind aus Kohlenstoff-beschichtetem Silizium- oder Zerodur-Substrat (quadratische Rauheit 0.5\AA , 0.5m Länge) hergestellt. Die Eigenschaften der BL-Beamlines sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

In die Beamlines sind ein Gasabschwächer und zwei Diagnoseeinheiten mit Aperturen ($\varnothing 1\text{mm}$, 3mm , 5mm , 10mm) und Ce:YAG-Szintillatoren in 20m bzw. 25m Entfernung vom Undulatorende integriert [11]. Der Gasabschwächer besteht aus einem 15m langen Rohr mit differentieller Druckstufe, das je nach Wellenlänge mit bis zu etwa 0.1mbar Xenon, Krypton oder Stickstoff gefüllt wird und erreicht eine Abschwächung um mehrere Größenordnungen [139]. Die Druckstufe ist aus Mangel an geeigneten Fenstermaterialien im EUV-Spektralbereich erforderlich, sodass der gesamte Aufbau vom Nutzerexperiment über die Beamline und den Undulator bis zum Beschleuniger miteinander verbunden ist.

Der Freie-Elektronen Laser FLASH wurde Ende 2009 bis 15. Februar 2010 ausgebaut, wobei unter anderem ein siebtes Beschleunigerelement für höhere Photonenergien integriert wurde [137]. Die Parameter des Elektronen- und Laserstrahls vor und nach dem Umbau sind in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Nach dem genehmigten Projektvorschlag „FLASHII“ soll bis 2013 ein zusätzlicher Undulator mit variablem Abstand der Magnete und optionalem Seeding für die Nutzer bereit stehen [137].

Parameter	FLASH		LCLS
	bis 2009	ab 2010 ^{a)}	
<i>Elektronenstrahl</i>			
Elektronenergie [GeV]	1	1.25	4.31
Bunch Ladung [nC]	1	0.1-1	0.1-1
Max. Strom [kA]	2	2	2
Durchmesser (FWHM) [μm]	116		116
<i>Undulator</i>			
Periode [cm]	2.73	2.73	3
Gap [mm]	12	12	6.8
Max. magn. Flussdichte [T]	0.48	0.48	1.25
Undulatorparameter K	0.18	0.18	3.5
Länge [m]	27.3	27.3	132
<i>Laserstrahl</i>			
Photonenergie [eV]	max. 180	max. 301	480-9000
Wellenlänge [\AA]	min. 69	41.2	25.8 - 0.14
Spektr. Bandbreite (FWHM)	0.1-1%	0.1-1%	0.5-1%
Pulsdauer [fs]	10-50	<70-200	10-500
Repetitionsrate [Hz]	5 ^{b)} , 10 ^{6 c)}	10 ^{b)} , 10 ^{6 c)}	bis 60
Pulsenergie [μJ]	10 - 100	bis 300	2000-4000
Spitzenbrillanz	10 ²⁹ - 10 ³⁰	10 ³⁰ - 10 ³¹	10 ³³ - 10 ³⁴

Tabelle 3.2: Strahlparameter der Freie-Elektronen-Laser FLASH [1, 137] und LCLS (SXR) [140, 141]. Brillanzen in Photonen/(s mm² mrad² 0.1%BW). ^{a)} Nach Umbau (ab Feb. 2010). ^{b)} Pulszüge, ^{c)} innerhalb Pulszug

4 Aufbau und Funktionsweise der Hartmann-Sensoren

Zwei Wellenfrontsensoren, basierend auf dem Hartmann-Prinzip, wurden für den Einsatz im EUV-Bereich, speziell an FLASH, aufgebaut. Beide Messsysteme sind kompakt im Aufbau und verfügen über Justageeinrichtungen, sodass sie direkt an ein Experiment angebaut werden können.

4.1 Hartmann- und Hartmann-Shack-Verfahren zur Wellenfrontbestimmung

Die Information über die Phase des Strahls geht bei einer gewöhnlichen Messung der Intensität eines Strahls verloren. Durch die hier beschriebenen Verfahren wird die lokale Abstrahlrichtung in eine Ortsinformation übersetzt.

Die einfachste, 1900 von Johannes Hartmann beschriebene Möglichkeit besteht in der Aufteilung des Strahls durch ein Lochraster in einer ersten Ebene (Index 1) und Messung der Schwerpunkte der von den Subaperturen ausgehenden Teilstrahlen in der zweiten Ebene (2) im Abstand f [12]. Sofern die lokalen Propagationseigenschaften dadurch nicht gestört werden, folgt das Winkelmoment über die Subapertur j (siehe Abbildung 4.1)

$$\frac{\langle x \rangle_2^j - \langle x \rangle_1^j}{f} = \langle u \rangle_1^j = \beta_x^j \quad (4.1)$$

(y analog). Demnach ist der Wellenfrontgradient β_x^j bestimmt, wenn $\langle x \rangle_2^j$ gemessen und $\langle x \rangle_1^j$ bekannt ist („absolute Referenz“, Abschnitt 5.1.2). In der Praxis ist diese Position durch mechanische Bauteiltoleranzen nicht immer mit hinreichender Genauigkeit bekannt. Dann kann der Wellenfrontgradient des Strahls („ s “) relativ zu einem bekannten Referenzstrahl („ r “) gemessen werden.

$$\frac{\langle x \rangle_{2,s}^j - \langle x \rangle_{2,r}^j}{f} = \langle u \rangle_{1,s}^j - \langle u \rangle_{1,r}^j = \beta_{x,relativ}^j \quad (4.2)$$

Die bislang wichtigste Verbesserung dieses Messprinzips wurde 1971 von R. Shack und B. Platt beschrieben [13] und besteht darin, das Lochraster durch ein Raster aus Mikrolinsen zu ersetzen und die Schwerpunkte in der Brennebene der Linsen zu messen. Dadurch wird die Subapertur vergrößert, also die Beugung reduziert und das Licht effizienter ausgenutzt. Die am Freie-Elektronen-Laser FLASH eingesetzten Wellenfrontsensoren arbeiten nach dem Hartmann-Prinzip, weil die hohe Absorption die Verwendung refraktiver Linsen im EUV-Spektralbereich ausschließt. In Kapitel 8 wird ein *Hartmann-Shack-Sensor* zur Untersuchung von thermischen Verformungen an Röntgenspiegeln mit einem Infrarot-Teststrahl verwendet.

In dieser Arbeit wird die Intensität der Teilstrahlen mit einer CCD („Charge Coupled Device“) gemessen. Wegen der guten Linearität (typischerweise einige Promille Abweichung) folgt der Schwerpunkt direkt aus den Zählwerten N_l und Positionen x_l der zu einer Subapertur (i, j) gehörenden Pixel l

$$\langle x \rangle^{ij} = \sum_l N_l x_l \quad (4.3)$$

Typischerweise wird eine Genauigkeit von Pixelbreite/100 bei der Schwerpunktsbestimmung erreicht, wenn der Teilstrahl mindestens einige Pixel breit ist.

Die Wellenfront wird aus den Gradienten $\beta_x = \hat{S}_x$ durch zonale oder modale Rekonstruktion bestimmt. Die zonale Rekonstruktion basiert auf der Ersetzung der gemessenen Wellenfrontgradienten durch Differenzenquotienten und Lösen des resultierenden Gleichungssystems [79]. Hier wird eine modale Rekonstruktion verwendet, eine Ausgleichsrechnung für die Wellenfrontgradienten an den einzelnen Löchern („Subaperturen“), ausgedrückt in einer Polynombasis P_k , $k = \{1, \dots, N\}$ [142, 143].

$$\beta_x(x_i, y_j) = \frac{\partial w(x_i, y_j; z_m)}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^N c_k(z_m) \frac{\partial P_k(x_i, y_j)}{\partial x_i} \quad (4.4)$$

Es folgt ein Gleichungssystem $\mathbf{Bc} - \boldsymbol{\beta} = 0$, wobei $\boldsymbol{\beta}$ ein Vektor ist, der die gemessenen Komponenten der Wellenfrontgradienten aller Subaperturen enthält. Die Matrix \mathbf{B} hängt von der Wahl der Polynombasis und von den Koordinaten der Stützpunkte ab. Bei den hier dargestellten Messungen ist das Gleichungssystem deutlich überbestimmt. Ein rechteckiges 15x15-Gitter liefert 450 Komponenten des Wellenfrontgradienten gegenüber nur 37 Koeffizienten der Polynome aus Anhang A.2. Die Wellenfronten wurden mit der Software „MrBeam“ des Laser-Laboratoriums berechnet, die eine Lösung nach der Methode der kleinsten Quadrate durch Singulärwertzerlegung berechnet [144].

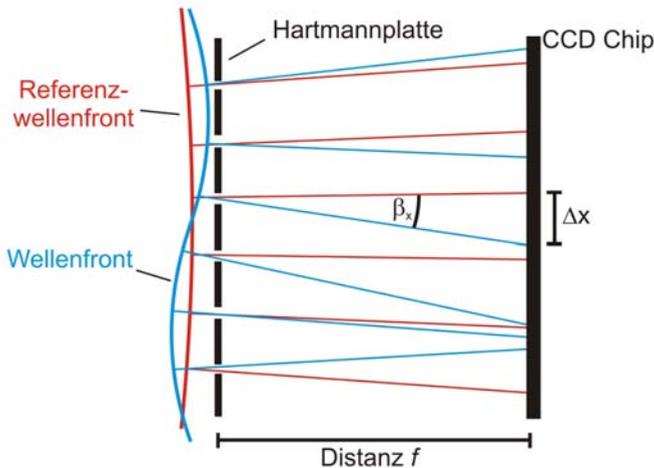


Abbildung 4.1: Messprinzip Hartmann-Sensor [15]

4.2 Konstruktion der Hartmann-Sensoren

Die zwei für den Einsatz am FLASH konstruierten Hartmann-Wellenfrontsensoren sind freitragende Systeme und können über einen CF63-Vakuumflansch an ein Experi-

ment angekoppelt werden. Die äußeren Abmessungen des zuerst fertiggestellten Sensors („Sensor 1“, „erster Sensor“, Abbildung 4.3) sind ca. 240mm x 240mm x 300mm, er kann lateral um ca. ± 10 mm verfahren werden und um ca. $\pm 10^\circ$ geneigt. Der später konstruierte „zweite Sensor“ („Sensor 2“, Abbildung 4.2) hat die Abmessungen 370mm x 370mm x 390mm (Grundplatte ohne Mikrometerschrauben 200mm x 200mm), kann seitlich um ± 12.5 mm verfahren werden und ebenfalls um $\pm 10^\circ$ geneigt, wobei eine Motorisierung der Justage möglich ist.



(a) Außenansicht



(b) Innenrohr



(c) Folienhalterung

Abbildung 4.2: Der zweite am FLASH eingesetzte Hartmann-Wellenfrontsensor.

Die Teile des zweiten Sensors wurden aus Edelstahl in der Werkstatt des Deutschen Elektronen-Synchrotrons gefertigt. Die Hartmannplatte ist mit dem Detektor über fünf Verbindungsstellen fest verbunden: Der Chip ist in die abschließende Stahlplatte geklebt (Klebstoff Araldite 2014-1, schwach ausgehärtet), die mit einem etwa 173mm langen Abstandsrohr (Abbildung 4.2b, $\varnothing 60$ mm, die Löcher unterstützen die Evakuierung) und einer Aufnahmeplatte für die Folienhalterung verlötet ist. Diese klemmt die Hartmannplatte und ist mit der Aufnahmeplatte verschraubt um ein einfaches Wechseln zu gewährleisten. Der Innenaufbau wird über einen Flansch, mit dem er fest verlötet ist, mit der Justageeinheit verschraubt. Die mechanische Stabilität wurde im Vergleich zum ersten Sensor durch einen erhöhten Durchmesser des inneren Rohres ($\varnothing 60$ mm gegenüber $\varnothing 25$ mm) und den zur Mitte hin verlegten Halterungspunkt erhöht. Zu-

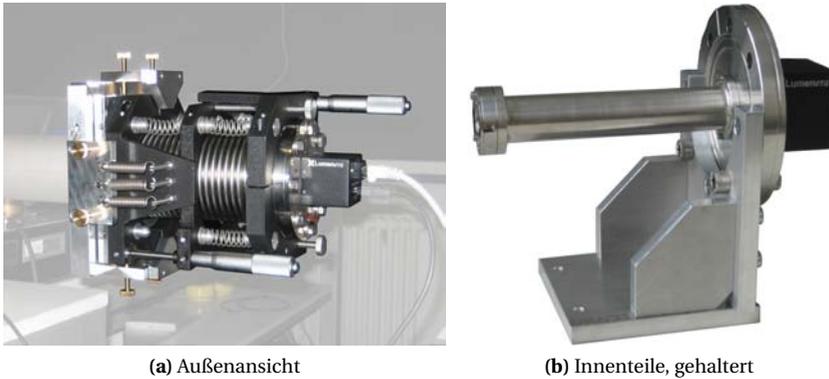


Abbildung 4.3: Der erste am FLASH eingesetzte Hartmann-Wellenfrontsensor.

dem wurden zur verbesserten Stabilität und Planparallelität von Detektor und Hartmannplatte Schraubverbindungen vermieden. Beide Sensoren verwenden einen CCD Chip (Sony ICX, Pixelgröße $6.45\mu\text{m}$, „frontside illuminated“) zur Bestimmung des Ortsmoments für jeden von einer Subapertur ausgehenden Teilstrahl. Der Chip wird mit maximal 15Hz ausgelesen, wobei die Kamera des ersten Sensors (Lumenera LM165, $8.3\text{mm} \times 6.6\text{mm}$ aktive Chipfläche) 12Bit liefert und die Kamera des zweiten (Soft-hard MR285, $9\text{mm} \times 6.7\text{mm}$) mit 14Bit geringeres Bitrauschen produziert. Es wurde jedoch je nach Belichtungszeit ein zusätzlicher Schwellwert gesetzt, unterhalb dessen Pixel-Zählwerte nicht in die Schwerpunktsbestimmung eingehen. Da dies nur durch die Grafik-Software geschieht, reduziert sich die effektive Bittiefe entsprechend, der Offset der Ausleseelektronik bleibt unverändert. Einige wenige Fehlpixel je Chip wurden in Dunkelaufnahmen identifiziert und durch Mittelung über die benachbarten Pixel korrigiert. In dieser Arbeit werden meist kurze Belichtungszeiten ($\sim\text{ms}$) verwendet und die Anzahl der Photonen pro Pixel ist $> 10^5$, sodass das Photonenrauschen gegenüber dem Auslese- und Dunkelstromrauschen dominiert (Herstellerangaben Lumenera / Softhard: „full well capacity“ $e^-/\text{Pixel} > 18000$, Ausleserauschen $8e^-$, Dunkelstrom $2e^-/(\text{Pixel s})$).

Der Chip ist mit dem Szintillator P43 beschichtet ($\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S} : \text{Tb}$, Korngröße $1\mu\text{m}$, ca. $3\text{-}4\mu\text{m}$ Dicke, Kantenschärfe ca. 125-167 Linienpaare/mm, Abklingzeit ca. 1ms, Herstellerangaben: Proxitronic (Bensheim)) um die auftreffende EUV-Strahlung in sichtbares Licht umzuwandeln. Die zentrale Emissionswellenlänge 545nm liegt im Bereich des Sensitivitätsmaximums des CCD Chips.

Der Abstand des Chips zum Hartmann-Gitter f ist beim ersten Sensor 97.08mm , für den zweiten Sensor gilt $f = 198.31\text{mm}$. Ein großer Abstand f verbessert die Messgenauigkeit, weil die Winkelauflösung theoretisch proportional mit dem Abstand f wächst (in der Praxis wegen der abnehmenden mechanischen Stabilität etwas schwächer). Für den Einsatz an den Beamlines soll der Abstand im Rahmen eines kompakten, tragbaren Systems bleiben. Nach dem Rayleigh-Kriterium zur Wellenfrontdeformation ($w_{pv} \leq \lambda/4$, Abschnitt 2.3.2), beträgt die erforderliche Winkelmessgenauigkeit bei $\lambda = 13.5\text{nm}$ und 5mm Strahlbreite ca. $1\mu\text{rad}$. Für den ersten Sensor folgt

eine erforderliche Genauigkeit der Schwerpunktbestimmung von Pixelbreite/100, für den zweiten Pixelbreite/50. Erfahrungsgemäß ist die Messgenauigkeit etwa Pixelbreite/100. Dieser Wert wird nur bei voller Ausnutzung der Dynamik der Kamera erreicht. Messungen sind möglich bei Fluenzen von ca. 100nJ bis $1\mu\text{J}$, möglichst sollte sie mehr als $\sim 0.5\mu\text{J}$ betragen. Nach einer experimentellen Abschätzung (siehe Abschnitt 6.1) ist die Fluenz bei einer Hartmann-Messung über zwei Größenordnungen unterhalb der Schwelle, bei der eine starke Nichtlinearität des Szintillators die Schwerpunktbestimmung verfälschen könnte.

Die relativen Längen und Abstände von Lochdurchmesser \varnothing , Lochabstand p und Abstand vom Hartmann-Gitter zur CCD f müssen sicher stellen, dass ein Teilstrahl ausreichend viele Pixel für eine exakte Schwerpunktbestimmung ausleuchtet, die Teilstrahlen aber nicht miteinander interferieren oder gar eine Zuordnung der Teilstrahlen zu einzelnen Subaperturen unmöglich wird. Um eine möglichst gute Konzentration des Lichts von einer Subapertur und eine hohe Messgenauigkeit zu erreichen, wird die folgende Überlegung angestellt: verkleinert man eine Apertur, so verkleinert sich der davon ausgehende Lichtstrahl im Nahfeld und er verbreitert sich im Fernfeld. Im Falle des gewählten Lochdurchmessers ist der Übergang vom Nah- zum Fernfeld bei zuvor festgelegtem Abstand f gerade in der Ebene des Detektors.

Die Dicke d der Metallfolie der Hartmann-Gitter gewährleistet ein möglichst großes Aspektverhältnis \varnothing/d . Wird dieses zu klein, können Abschattungs- und Lichtführungseffekte die Messung beeinflussen. Andererseits ist die Folie dick genug, um die auffallende Strahlung zuverlässig zu absorbieren und mechanisch auch über einen längeren Zeitraum stabil zu bleiben.

Bei allen Hartmann-Platten sind die Löcher kreisrund (bis auf herstellungsbedingte Variationen) und in einem rechteckigen Raster angeordnet (Abbildung 4.4). Mit Ausnahme der Nickel-Platte wurden alle durch Abbildung einer Lochblende auf die Metallfolie mit einem Excimer-Laser (193nm ArF, Fluenz $125\text{mJ}/\text{cm}^2$) gebohrt. Abbildung 4.4a zeigt eine Lichtmikroskopaufnahme (Vergrößerung 10x) einer Hartmannplatte aus $7\mu\text{m}$ Aluminium ($p = 320\mu\text{m}$, $\varnothing 70\mu\text{m}$), gebohrt mit 14-facher Verkleinerung und fünf Laserpulsen je Loch. Die Transmission der Metallfolie ist vernachlässigbar im gesamten von FLASH abgedeckten Wellenlängenbereich.

Bei der an LCLS verwendeten Wellenlänge $\lambda = 1.5\text{nm}$ wäre die Transmission bereits 0.2% [74], sodass Hartmannplatten aus Tantal verwendet wurden ($7\mu\text{m}$, $p = 320\mu\text{m}$, $\varnothing = 65\mu\text{m}$). Tantal zeichnet sich durch einen hohen Absorptionsquerschnitt und gute mechanische Stabilität der dünnen Folien aus, ist jedoch schwerer zu ablatieren, sodass eine 30-fache Verkleinerung und 300 Pulse je Bohrstelle gewählt wurden. Wie in der Auflichtmikroskopaufnahme Abbildung 4.4b zu sehen, leidet die Abbildungsqualität unter der starken Verkleinerung und ablatiertes Material lagert sich am Rand des Loches ab. Unter dem Durchlichtmikroskop (Abbildung 4.4c) sieht man, dass dennoch weitgehend eine Kreisform gegeben ist.

Abbildung 4.4d zeigt eine Hartmannplatte aus $20\mu\text{m}$ dickem Nickel ($p = 250\mu\text{m}$, $\varnothing 75\mu\text{m}$, Hersteller: Precision Eforming (Cortland, NY)), hergestellt durch Galvanoformung, die bei dem zweiten Sensor eingesetzt wird. Als Justagehilfe besitzen die lasergebohrten Platten ein ausgespartes Loch in der Mitte und die galvanoformten ein vergrößertes Loch rechts unten.

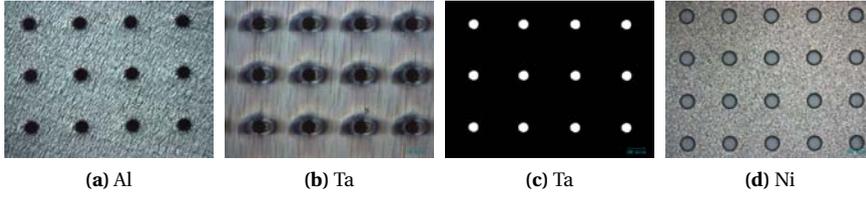


Abbildung 4.4: Lichtmikroskopaufnahmen (10x) verschiedener Hartmann-Platten, (d) wurde galvanogeformt, alle weiteren lasergebohrt. (b,c) zeigen dieselbe Hartmann-platte in Auflicht- bzw. Durchlichtmikroskopie.

Die Ausrichtung des Sensors ist in Abschnitt 5.1.3 beschrieben. Auch nach längerem Einsatz an FLASH und LCLS hat keine der Hartmann-Platten sichtbare Schäden gezeigt.

4.3 Berechnung der Strahlparameter

4.3.1 Zweite Momente aus den Messdaten des Hartmann-Sensors

Die Momente der Wignerverteilung können für einen vollkohärenten Strahl aus den Messwerten des Hartmann-Sensors (diskrete Werte für Wellenfrontgradienten und Intensitäten) bestimmt werden. Endliche Bittiefe, Dynamik und Fehler durch die Diskretisierung seien zunächst vernachlässigt („idealer Hartmann-Sensor“ [145]). Die Integrale werden bei Anwendung auf Messdaten durch Summen ersetzt.

Aus der Ableitung der Deltafunktion folgt die Darstellung [145]

$$\langle x^i y^j u^k v^l \rangle = (-ik)^{-k-l} P^{-1} \iint dx dy x^i y^j \left[\partial_{s_x}^k \partial_{s_y}^l J(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \right]_{\mathbf{s}=0} \quad (4.5)$$

für die Momente der Wignerfunktion (1.25). Einsetzen der Mutual Intensity in der Form (1.21) und Verwendung von

$$0 \leq g(\mathbf{x}; \mathbf{s}) \leq 1, \quad g(\mathbf{x}; 0) = 1, \quad g(\mathbf{x}; \mathbf{s}) = g(\mathbf{x}; -\mathbf{s}) \quad (4.6)$$

$$\alpha(\mathbf{x}; 0) = 0, \quad \alpha(\mathbf{x}; \mathbf{s}) = -\alpha(\mathbf{x}; -\mathbf{s}) \quad (4.7)$$

liefert die ersten Momente

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{P} \iint dx dy \mathbf{x} I(\mathbf{x}), \quad \langle \mathbf{u} \rangle = \frac{1}{P} \iint dx dy \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}) \quad (4.8)$$

wobei der Wellenfrontgradient aus der Mutual Phase gemäß (1.29) berechnet wird, und die zweiten Momente lauten

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{P} \iint dx dy x^2 I(\mathbf{x}) \quad (4.9)$$

$$\langle xu \rangle = \frac{1}{P} \iint dx dy x \beta_x(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}) \quad (4.10)$$

$$\langle uv \rangle = \frac{1}{k^2 P} \iint dx dy \left\{ \frac{\partial_x I(\mathbf{x}) \partial_y I(\mathbf{x})}{4I(\mathbf{x})} + k^2 I(\mathbf{x}) \beta_x \beta_y - I(\mathbf{x}) \partial_{s_x} \partial_{s_y} g(\mathbf{x}; 0) \right\} \quad (4.11)$$

$$\langle u^2 \rangle = \frac{1}{k^2 P} \iint dx dy \left\{ \frac{(\partial_x I(\mathbf{x}))^2}{4I(\mathbf{x})} + k^2 I(\mathbf{x}) \beta_x^2 - I(\mathbf{x}) \partial_{s_x}^2 g(\mathbf{x}; 0) \right\} \quad (4.12)$$

[145]. Die verbleibenden Momente $\langle y^2 \rangle$, $\langle xy \rangle$ werden analog zu $\langle x^2 \rangle$ gebildet, $\langle xv \rangle$ und $\langle yv \rangle$ analog zu $\langle xu \rangle$ und schließlich $\langle v^2 \rangle$ analog zu $\langle u^2 \rangle$. Die zentrierten zweiten Momente können aus den ersten und zweiten Momenten in der bekannten Weise $\langle (u - \langle u \rangle)^2 \rangle = \langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2$ berechnet werden. Um die Abhängigkeit der Strahlparameter vom Rauschen auf einzelnen Wellenfrontgradienten zu verringern, werden die Gradienten an die rekonstruierte Wellenfront anstelle der direkt gemessenen Gradienten in die Berechnung der Fernfeldmomente einbezogen.

4.3.2 Globale Strahlparameter

Eine wichtige Anwendung der Hartmann-Sensoren ist die Justage von Spiegeln. Wenn der Astigmatismus durch Justage reduziert wird, verringert sich auch der Abstand zwischen den Strahltaillen (die astigmatische Differenz). Die Taillendurchmesser in x - und y -Richtung ändern sich jedoch nur geringfügig. Es wurden „globale“ Strahlparameter eingeführt [16], um die Lage und den Durchmesser der effektiven Strahltaille zwischen den Linienfoki zu definieren und die Verkleinerung der Strahltaille während des Justageprozesses zu dokumentieren.

Die globalen Strahlparameter basieren auf der Strahldurchmesserdefinition

$$d = 2^{3/2} \sqrt{\langle x \rangle^2 + \langle y \rangle^2} \quad (4.13)$$

für einen näherungsweise kreisrunden Strahl, worunter ein Strahl mit Elliptizität (Verhältnis von minimalem zu maximalem Strahldurchmesser im Hauptachsensystem des Strahls) $\epsilon \geq 0.87$ verstanden wird [14]. Der Durchmesser propagiert hyperbolisch

$$d(z) = d_0 \sqrt{1 + \frac{(z - z_0)^2}{z_R^2}} \quad (4.14)$$

mit dem Durchmesser d_0 und der Lage z_0 der Strahltaile sowie der Rayleighlänge z_R . Die Parameter können ganz analog zu denen für x und y interpretiert und auf diese zurückgeführt werden (siehe unten). Mit dem Durchmesser lässt sich die Strahlfläche

$$A_K = 2\pi (\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle) \quad (4.15)$$

assoziiieren, die für eine homogen ausgeleuchtete Lochblende gerade ihrer Fläche entspricht.

Der Strahldurchmesser ist invariant unter Drehungen der Koordinaten in der Detektorebene und „bevorzugt“ kreisrunde Strahlen im folgenden Sinn. Durch Drehung des Koordinatensystems kann das Hauptachsensystem des Strahls ausgewählt werden. Dann ist ein anderes sinnvolles Flächenmaß die Fläche der Varianzellipse [22]

$$A_\epsilon = 4\pi \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle} \quad (4.16)$$

Das Verhältnis A_K/A_ϵ ist eins für Elliptizität $\epsilon = 1$ und sonst größer eins. Der Strahldurchmesser (4.13) eines elliptischen Strahls wächst bei gegebener Fläche (4.16) für kleine Elliptizität wie $1/\sqrt{\epsilon}$. Die Strahltaile des Durchmessers (4.13) wird daher eher an einer z -Position mit annähernd kreisrundem Strahlprofil liegen.

Einsetzen des Propagationsgesetzes der zweiten Ortsmomente (2.37) in die Strahldurchmesserdefinition (4.13) und Vergleich mit (4.14) liefert mit $d_x^2 = 16\langle x^2 \rangle$ und $d/z \rightarrow \theta$ für $z \rightarrow \infty$ die globalen Strahlparameter in Abhängigkeit der Parameter für x und y .

$$z_0 = \frac{z_{0,x}\theta_x^2 + z_{0,y}\theta_y^2}{\theta_x^2 + \theta_y^2} \quad (4.17)$$

$$d_0 = 2^{-1/2} \sqrt{d_{0,x}^2 + d_{0,y}^2 + \frac{\theta_x^2\theta_y^2}{\theta_x^2 + \theta_y^2} (z_{0,x} - z_{0,y})^2} \quad (4.18)$$

$$\theta = \sqrt{\frac{\theta_x^2 + \theta_y^2}{2}} \quad (4.19)$$

$$z_R = \frac{d_0}{\theta} \quad (4.20)$$

4.4 Einfluss der transversalen Kohärenz

Ein Vorteil des Hartmann-Prinzips gegenüber vielen anderen (z.B. interferometrischen) Verfahren zur Bestimmung der Wellenfront ist die Anwendbarkeit auf partiell kohärente Strahlen. Im Gegensatz zu Intensität und Phase kann der Kohärenzgrad mit einem Hartmann-Sensor nicht gemessen werden und beeinflusst die Messung und die Berechnung der Strahlparameter in zweifacher Hinsicht durch

- das hinter dem Hartmann-Gitter gemessene Intensitätsprofil,
- die Kohärenzabhängigkeit der zweiten Momente.

Der Effekt des Kohärenzgrades auf den Durchmesser der einzelnen Spots kann man leicht im 2.-Momenten-Formalismus abschätzen. Aus (4.6) folgt

$$\partial_{s_x}^2 g(\mathbf{x}; 0) \leq 0, \quad \partial_{s_y}^2 g(\mathbf{x}; 0) \leq 0 \quad (4.21)$$

und nach (4.12) wächst die Divergenz mit abnehmendem Kohärenzgrad (formal ist die paraxiale Optik und der Formalismus der zweiten Momente hinter scharfen Aperturen nicht anwendbar, man kann den Strahl an der Apertur jedoch näherungsweise als rasch abfallend statt scharf berandet sehen). Soll der Hartmann-Sensor eingesetzt werden, muss der zu vermessende Strahl also mindestens einen solchen Grad an räumlicher Kohärenz aufweisen, der eine klare Trennung der von den einzelnen Subaperturen ausgehenden Teilstrahlen zulässt. Die hier betrachteten Freie-Elektronen-Laser besitzen einen hohen transversalen Kohärenzgrad und erfüllen die Bedingung deutlich.

Mit der transversalen Kohärenzlänge des FLASH-Strahls aus [55] und dem skalierten Strahldurchmesser aus [1], folgt horizontal $q_H = 0.4$ und vertikal $q_V = 0.36$ (siehe Abschnitt 2.1.3). In einer Messebene mit 5mm Strahldurchmesser ist $\sigma_g \sim 0.5\text{mm}$ (solange der Strahl sich ähnlich wie ein Gauß-Schell-Strahl verhält). Weil der Durchmesser einer Subapertur deutlich kleiner ist, kann der Kohärenzterm gegenüber den Intensitätstermen in 4.12 vernachlässigt werden. Vergleichende numerische Berechnungen zur Propagation der wechselseitigen Kohärenzfunktion hinter dem Hartmann-Gitter bestätigen die Abschätzung. Man kann aus dem Beugungsbild der einzelnen Spots hinter einer Hartmannplatte zusätzliche Kohärenzinformationen gewinnen [146], jedoch können durch eine einzelne Subapertur nur kurze Abstände in der Mutual Intensity getestet werden.

Für das mit dem idealen Hartmann-Sensor bestimmte zweite Fernfeldmoment $\langle u^2 \rangle_{HS}$ gilt die Beziehung [145]

$$\langle u^2 \rangle_{HS} = \langle u^2 \rangle + \frac{1}{k^2 P} \iint d^2 x I(\mathbf{x}) \partial_{s_x}^2 g(\mathbf{x}; \mathbf{s} = 0) \quad (4.22)$$

Wegen (4.21), ist dieses stets kleiner oder gleich dem tatsächlichen Moment $\langle u^2 \rangle$. Man kann die Strahlparameter korrigieren, indem die fehlende Kohärenzinformation mit anderen Verfahren bestimmt wird bzw. Modellannahmen bezüglich der Kohärenz getroffen werden. Dieser Ansatz wird in Abschnitt 5.1.6 weiter verfolgt. Alternativ kann die Divergenz direkt durch eine zusätzliche Fernfeldmessung bestimmt werden [145].

5 Wellenfrontmessungen an FLASH Beamlines

In diesem Kapitel wird der Einsatz der beiden Hartmann-Sensoren an den Beamlines BL1 und BL2 des Freie-Elektronen-Lasers FLASH zur Charakterisierung des Strahls und der Beamline beschrieben. Im ersten Teil werden der experimentelle Aufbau und die Vorbereitung des Sensors zur Messung dargestellt, im zweiten Teil die Justage der Optiken und Bestimmung der Strahlparameter [147].

5.1 Experimenteller Aufbau und Vorbereitung des Sensors

5.1.1 Experimenteller Aufbau

Die Hartmann-Sensoren wurden an den Beamlines [11] BL1 (Toroidspiegel, Brennweite $f = 10\text{m}$) und BL2 (Ellipsoidspiegel $f = 2\text{m}$, wahlweise herausfahrbar) eingesetzt. Die verschiedenen Experimente zur Strahlcharakterisierung sind in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Die Sensoren wurden sowohl direkt im Strahl eingesetzt (Position B in der Grafik), als auch hinter einem Chrom- oder Gold-beschichteten Planspiegel (Position C). Der gesamte Aufbau ist evakuiert ($\sim 10^{-6}\text{mbar}$), sodass der Planspiegel neben der Abschwächung der Intensität und der Verlängerung der verfügbaren Propagationsstrecke am Experimentierplatz auch dazu dient, zwei Hartmann-Sensoren parallel einzusetzen ohne die Apparatur zu belüften.

Die Sensoren wurden freitragend (nur durch den Vakuumflansch gehalten) an eine Kammer angebracht oder auf einem Dreibein montiert und der Strahl durch CF-Rohre mit 40mm Durchmesser dorthin geführt. Nahe der Brennebene (Position A) wurden

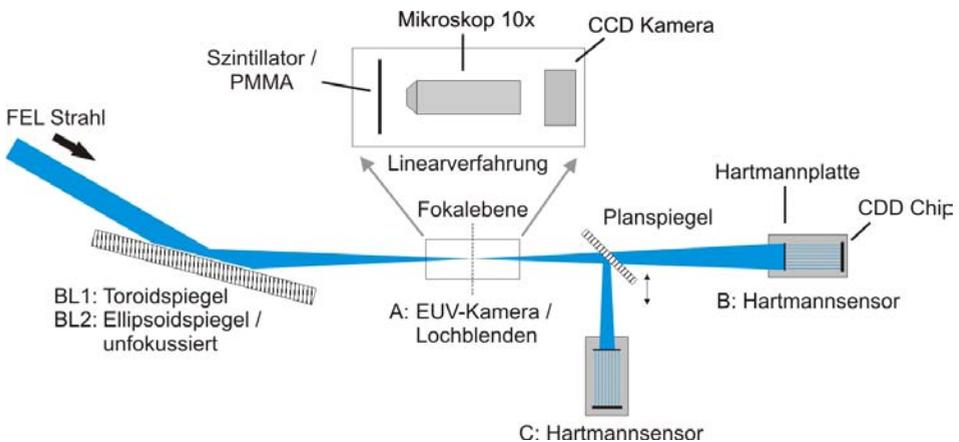


Abbildung 5.1: Schematischer Aufbau der Experimente zur Strahlcharakterisierung an den FLASH Beamlines BL1 und BL2.

Lochblenden in den Strahlengang eingebracht um Referenzwellenfronten zur Kalibrierung des Sensors zu erzeugen (Abschnitt 5.1.2). An derselben Position wurde an BL2 eine EUV-Kamera eingesetzt um Strahlprofile für eine Charakterisierung nach der Me-

thode der zweiten Momente bzw. durch Rekonstruktion der Wignerfunktion aufzunehmen (Kapitel 6).

5.1.2 Kalibrierung des Sensors

Die Hartmann-Sensoren wurden mit drei Verfahren kalibriert: Filterung von Raumfrequenzen, absolute Kalibrierung und Aufnahme einer Referenzwellenfront an einer Laser-Plasma-Quelle.

Zur *Filterung von Raumfrequenzen* wurden Lochblenden (Newport PH-5 aus Molybdän) mit Durchmesser $5\mu\text{m}$ in Nähe des Brennpunktes in den Strahlengang an den FLASH Beamlines eingebracht [15, 148]. Hartmann-Sensor und Lochblende wurden gegenseitig so positioniert, dass der Durchmesser der zentralen Airy-Scheibe mindestens der doppelten Sensordiagonale entsprach.

Abbildung 5.2a zeigt eine Kalibrationsaufnahme, die November 2010 an BL2 mit dem zweiten Sensor aufgenommen wurde. Die Lochblende wurde dazu 100mm vor der Brennebene des Ellipsoidspiegels ($f = 2\text{m}$) und 3592mm vor dem Hartmann-Sensor in den ca. $500\mu\text{m}$ breiten Strahl ($\lambda = 13.5\text{nm}$) eingebracht. Die Pulsenergie von $100\mu\text{J}$ wurde mit einer 100.9nm dicken Aluminiumfolie und einer 216.1nm dicken Siliziumplatte vor der Lochblende abgeschwächt. Für die Referenzaufnahme wurden 100 Aufnahmen eines Pulszugs à 30 Pulse gemittelt.

Die Wiederholgenauigkeit der Messung wurde untersucht, indem die Wellenfront von Einzelpulsen, gefiltert durch eine $5\mu\text{m}$ Lochblende, bestimmt und die mittleren Werte für w_{pv} und w_{rms} berechnet wurden. Sie liegen mit $w_{pv} = \lambda_{13.5\text{nm}}/19$ und $w_{rms} = \lambda_{13.5\text{nm}}/116$ ($a = 3.07\text{mm}$) für den zweiten Sensor noch etwas unter den auf die gleiche Weise bestimmten und zuvor berichteten [15] Werten $w_{pv} = \lambda_{13.5\text{nm}}/15$ und $w_{rms} = \lambda_{13.5\text{nm}}/90$ ($a = 3.04\text{mm}$) des ersten Sensors. Systematische Messfehler können durch eine in Kapitel 6 beschriebene Vergleichsmessung abgeschätzt werden, bei der die Strahlparameter mit einer Messung nach ISO 11146 verglichen wurden.

Ein solcher Fehler folgt aus der Bestimmung des Abstandes von der Lochblende zum Hartmann-Sensor bei der Kalibrierung durch Raumfilterung. Der Abstand wurde mit einem Lasermessgerät vor dem Evakuieren der Apparatur bestimmt, wobei ein Fehler von $\pm 2.5\text{mm}$ angenommen wird. Da sich die Defokuskoeffizienten a_{200} von Referenzwellenfront und relativer Hartmann-Messung addieren, gilt dies auch für die Kehrwerte der Krümmungsradien R , die aus $a_{200} = -a^2/(4R)$ (Auswerteradius a) hervorgehen. Es folgt die Fehlerabschätzung

$$\Delta R (\Delta R_{ref}) = \left(\frac{R}{R_{ref}} \right)^2 \Delta R_{ref} \quad (5.1)$$

wobei R und R_{ref} die Krümmungsradien der gemessenen Wellenfront und Referenzwellenfront sind. Die Messebene des Hartmann-Sensors liegt in dieser Arbeit immer viele Rayleighlängen von der Strahltaille entfernt, sodass der Fehler der Tailenlage in guter Näherung mit dem Fehler des Radius übereinstimmt. In der Messung mit Fokussierspiegel entspricht dieser ca. 2mm , ohne Fokussierspiegel hingegen etwa 1.1m .

Die *absolute Referenz* des Sensors ist durch die idealen Positionen der Schwerpunkte für eine ebene Welle gegeben. Bedingung für eine absolute Kalibrierung ist ausreichen-

de mechanische Präzision der Hartmann-Platte und ihrer relativen Lage zum CCD Chip. Insbesondere Verkippung der Hartmann-Platte gegenüber der Detektorebene, Positionierungsfehler der Löcher und Drehung des Gitters in der Ebene (planparallel zum Detektor) stören die Berechnung der Wellenfront. Laterale Positionierungsfehler bewirken lediglich einen Tilt-Fehler.

Die *Laser-Plasma-Quelle* produziert Strahlung, indem ein Nd:YAG-Laser (1064, 2Hz, 800mJ/Puls, 7ns) in einen Krypton Gas-Jet (Düsendruck 15bar) in einer Vakuumkammer fokussiert wird und ein $250\mu\text{m} \times 150\mu\text{m}$ (FWHM) großes Plasma erzeugt [149]. Das Plasma strahlt in den gesamten Raumwinkel 4π ab und leuchtet den in 2786mm Abstand montierten Hartmann-Sensor nach Filterung mit einer 200nm dicken Titan-Folie breitbandig ($\lambda = 2.5\text{nm} - 6.5\text{nm}$) aus [16]. Für die in Abbildung 5.2b gezeigte Aufnahme wurde der Hartmann-Sensor mit 120 Pulsen in 60s belichtet. Entsprechend der Form des Plasmas sind die Profile der Teilstrahlen länglich. Die Platte wirkt wie ein Raster aus Lochkameras, dass viele Abbilder der Quelle erzeugt. Wegen der Beugung an der Apertur ist das Bild verwaschen und etwas kreisförmiger als die Quelle. Im Prinzip könnte die Referenz durch Raumfilterung verbessert werden, jedoch wurde keine ausreichende Intensität erzielt.

Die Wellenfrontaberrationen der absoluten und der Laborquellen-Referenz sind in Abbildung 5.3 dargestellt. Hier und im Folgenden bilden, sofern keine anderen Angaben gemacht werden, die 37 Zernike-Polynome aus Anhang A.2 die Polynombasis der modalen Wellenfrontrekonstruktion. Über das gesamte Raster von 32×24 Subaperturen folgt für die absolute Referenz $w_{pv} = 16.7\text{nm}$ und $w_{rms} = 2.9\text{nm}$, sowie für die Laborquellen-Referenz $w_{pv} = 22.4\text{nm}$ und $w_{rms} = 3.1\text{nm}$ gegen die durch Raumfilterung bestimmte FLASH-Referenz. Die Angaben zur Präzision des Sensors auf dem größten einbeschriebenen kreisrunden Auswertebereich („Area of Interest“, AOI) sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Die hier mit dem zweiten Sensor erreichte Genauigkeit der Laborquellen-Referenz entspricht gerade der bereits für den ersten Sensor berichteten [16]. Die Qualität der Referenzwellenfront ist offenbar der dominierende, vom gewählten Sensor unabhängige Fehler.

Mithilfe der absoluten Referenz kann der gegenteilige Ansatz gemacht werden. Der Vergleich der absoluten Referenz und einer guten, durch Raumfilterung bestimmten Referenzwellenfront gibt Aufschluss über mechanische Fehler der Bauteile. Für den ersten Sensor folgt $w_{pv} = 170\text{nm}$. Ein Großteil des Fehlers wird lediglich durch die Drehung der Hartmann-Platte hervorgerufen. Minimieren der gemessenen Wellenfrontgradienten durch eine Ausgleichsrechnung mit variablem Drehwinkel der Platte liefert einen Drehwinkel der absoluten Referenz von 0.15° und es verbleibt $w_{pv} = 52\text{nm}$ gegenüber den bereits erwähnten 16.7nm für den zweiten Sensor. Neben der größeren Wiederholgenauigkeit ist dies ein weiteres Indiz für die verbesserte mechanische Stabilität des zweiten Sensors.

Bei Vergleich der Wellenfrontaberrationen der Laborquellen- und der absoluten Referenz in Abbildung 5.3 fallen ähnliche Strukturen oben links und unten rechts auf. Diese sind bei Messung der Laborquellen-Referenz gegen die absolute Referenz, dargestellt in Abbildung 5.3c, deutlich schwächer und es gilt $w_{pv} = 9.4\text{nm}$ und $w_{rms} = 1.4\text{nm}$. Die Referenzaufnahme der Laborquelle zeigt daher vermutlich Artefakte, die sich erst durch den Transport des Sensors vom LLG zum DESY ergeben haben. Der Grund kön-

	$w_{pv}/\lambda_{13.5\text{nm}}$	$w_{rms}/\lambda_{13.5\text{nm}}$
<i>Wiederholgenauigkeit</i>		
FLASH-Referenzaufnahme	1/146	1/832
Einzelne Aufnahme	1/19	1/116
<i>Relativ FLASH-Referenz</i>		
Referenzaufnahme Laborquelle	1/1	1/7
Absolute Referenz	1/2	1/8

Tabelle 5.1: Genauigkeitsangaben zum neuen Sensor. Die Wiederholgenauigkeit gibt die mittlere Abweichung der FLASH-Referenzen gegeneinander, bzw. des Einzelpulses gegen die FLASH-Referenz an. Die relative Genauigkeit gibt die Werte einer Messung gegen eine FLASH-Referenz durch Raumfilterung an.

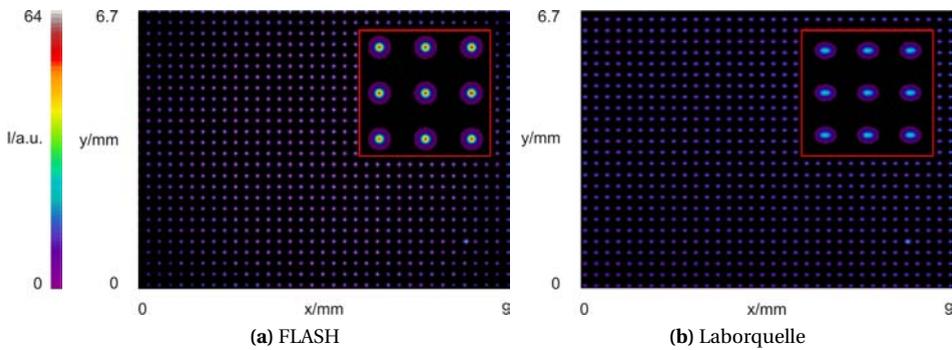


Abbildung 5.2: Referenzen für den zweiten Hartmann-Sensor, erzeugt durch Raumfilterung mit einer $5\mu\text{m}$ Lochblende an FLASH (a) bzw. durch eine Laser-Plasma-Quelle (b).

nen mechanische Veränderungen, etwa an der Hartmann-Platte, sein. Der Sensor wurde daher bei allen an FLASH durchgeführten Messungen vor Ort und mit möglichst geringem zeitlichem Abstand kalibriert.

5.1.3 Ausrichtung des Sensors

Der Sensor wird in den drei Translations-Freiheitsgraden x (horizontal), y (vertikal) und z (optische Achse) sowie den drei Winkel-Freiheitsgraden (Rollachse z , Nickachse x , Gierachse y) justiert. Die Mitte der Hartmann-Platte liegt im Drehpunkt der Verstellrichtung, sodass Translations- und Winkelbewegungen entkoppelt sind.

Zuerst wird eine z -Ebene ausgewählt, die eine gute Ausleuchtung des Gesichtsfeldes gewährleistet. Dabei sollten möglichst viele Subaperturen ausgeleuchtet sein und die Platte in jeder Richtung mindestens vier Standardabweichungen der Intensitätsvertei-

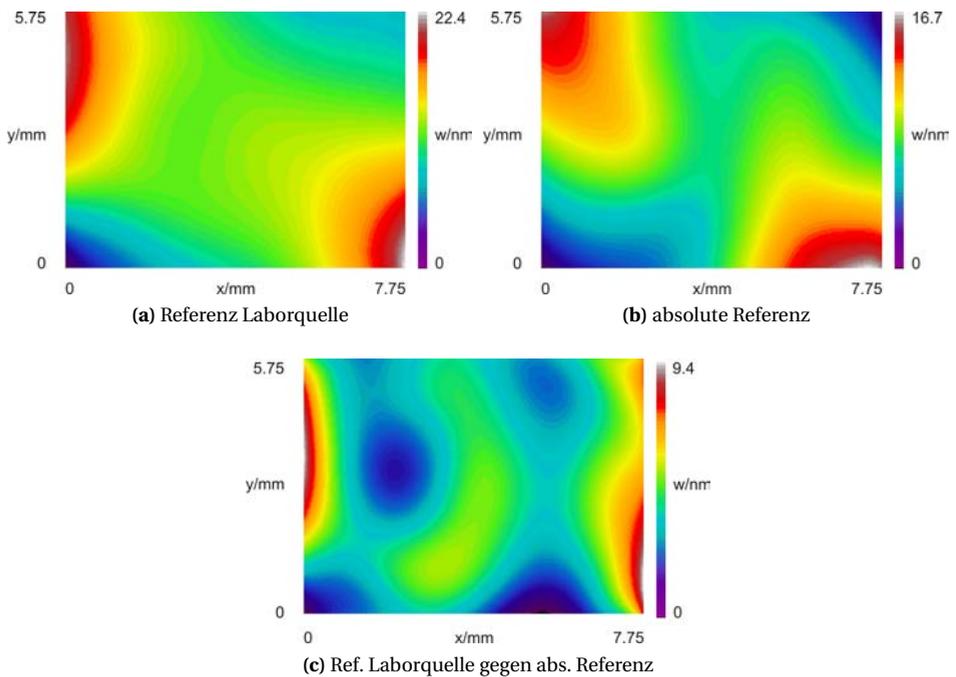


Abbildung 5.3: Wellenfrontaberrationen der Laborquellen-Referenz (a) und der absoluten Referenz (b), gemessen gegen eine am FLASH erzeugte Referenzaufnahme. (c) zeigt die Wellenfrontaberrationen der Laborquellen- relativ zur absoluten Referenz.

lung aufnehmen. Der Sensor wird entlang der x - und y -Achsen verfahren, bis der Strahl auf dem Sensor zentriert ist.

Der Rollwinkel wurde durch Ausrichten des Sensors mithilfe einer Wasserwaage eingestellt. Der Winkel wurde während der Messungen nicht weiter verändert, da alle Spiegel und der Undulator entlang dieser Koordinatenachsen ausgerichtet sind. Bei der Kalibrationsaufnahme mit der Lochblende wurde der Intensitätsschwerpunkt des Airy-Musters auf der CCD durch Einstellen des Nick- und Gierwinkels zentriert und so der Wellenfront-Tilt minimiert. Dadurch ist die Position der in den Abbildungen 5.2a und 5.2b unten rechts erkennbaren Justierhilfe festgelegt. Diese wird bei der späteren Messung durch Einstellen der Winkel an die gleiche Position gebracht. Dadurch wird der Tilt minimiert und das Profil jedes Teilstrahls einer bestimmten Subapertur zugeordnet. Ohne die Zuordnung kann w_{pv} bis zu wenigen Nanometern abweichen. Ist die Justagehilfe nicht durch den Strahl beleuchtet, so kann der Sensor wegen der entkoppelten Translations- und Winkelfreiheitsgrade lateral verfahren werden bis diese erscheint. Dann werden die Winkel eingestellt und schließlich wird der Sensor lateral zurückgefahren.

5.1.4 Abschwächung des Strahls

Die Pulsenergie lag bei den Messungen im Bereich von $5\mu\text{J} - 100\mu\text{J}$ und somit deutlich über den gewünschten $\sim 100\text{nJ}$. Die Abschwächung der Intensität erfolgte durch den Gasabschwächer [139] (siehe auch Abschnitt 3.4), dünne Transmissionsfilter aus unterschiedlichen Materialien und Reflexion an metallischen Spiegeln.

Wie schon zuvor berichtet wurde, sind keine durch den Gasabschwächer hervorgerufenen Wellenfrontaberrationen festzustellen [150]. Daher ist er hier bevorzugt verwendet worden, solange keine höhere Abschwächung erforderlich war. In Abhängigkeit von der Wellenlänge wird eine Abschwächung von ca. fünf Größenordnungen erreicht. Für die größte Abschwächung wird bis $\lambda = 19\text{nm}$ Stickstoff, Xenon im Bereich $\lambda = 9\text{nm} - 19\text{nm}$ und bei noch kürzeren Wellenlängen Krypton gewählt. Je nach Wellenlänge und Gas kann der Gasabschwächer die spektrale Zusammensetzung des Strahls ändern.

Mit den ebenfalls zur Abschwächung der Intensität eingesetzten metallischen Spiegeln (45° Einfallswinkel, p-Polarisation, Beschichtung Au, Ag, Cr) kann die Fundamentale abgeschwächt werden ohne die höheren Harmonischen relativ zu überhöhen (Grafik 5.1, Position C).

Mit dünnen Transmissionsfiltern von einigen 100nm lassen sich hohe Abschwächungsfaktoren bis zur vollständigen Absorption des Strahls realisieren. Das Material (Niob, Aluminium, Zirkon, Silizium) wurde anhand der gewünschten Abschwächung und spektralen Eigenschaften ausgewählt. Im Gegensatz zum Gasabschwächer führen Filter zu messbaren Wellenfrontaberrationen.

Exemplarisch wird im Folgenden die Überprüfung der Filter mit dem ersten Sensor auf Aberrationen beschrieben [16]. Dazu wurde der erste Sensor zunächst mit einer Referenzwellenfront durch das im vorhergehenden Abschnitt 5.1.2 beschriebene Verfahren der Raumfilterung kalibriert. Die Lochblende wurde 175mm vor dem Fokus und 3270mm vor dem Hartmann-Sensor platziert. Die Intensität von $8\mu\text{J}$ im Einzelpuls war

für die Messung ausreichend. Zur Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses wurden 10^3 dieser Aufnahmen gemittelt.

Danach wurden die Wellenfronten von 75 Einzelpulsen gemessen, Abbildung 5.4 zeigt vier Wellenfronten aus dieser Sequenz. Der Strahl wurde durch eine 137nm Al-Folie abgeschwächt und der Sensor in 3695mm Abstand von der Brennebene montiert um das Gesichtsfeld möglichst gut auszunutzen (Auswerteradius $a = 2.72\text{mm}$). Im Mittel gilt $w_{pv} = 48\text{nm}$ und $w_{rms} = 9.4\text{nm}$, wobei die relative Standardabweichung jeweils 10% beträgt. Die Fluktuationen der Wellenfront sind deutlich größer als die in Abschnitt 5.1.2 beschriebene Wiederholgenauigkeit des Sensors von $\lambda/15$ (w_{pv}) und $\lambda/90$ (w_{rms}) bei $\lambda = 13.5\text{nm}$. Angesichts der Schwankungen ist es einerseits wichtig Einzelpulse auflösen zu können, andererseits muss über mehrere Pulse gemittelt werden, wenn wie hier nicht die Quelle, sondern ein optisches Element untersucht wird.

Abbildung 5.5 zeigt die Wellenfronten hinter der 137nm dicken (a,b) und einer 200nm dicken (c) Al-Folie (ACF-Metals), gemittelt über 16 Pulse ($a = 2.44\text{mm}$, $\lambda = 13.5\text{nm}$). Die Abweichungen zwischen den Wellenfronten in (a) und (b) liegen nun im Bereich der Wiederholgenauigkeit des Sensors. Die Aberrationen der Folien sind klar zu erkennen, sie sind jedoch deutlich kleiner als die des später beschriebenen Fokussier spiegels. Die optische Weglängendifferenz, die sich aus der Dickentoleranz der Folien von $\pm 10\%$ (Herstellerangabe) ergibt, liegt bei $\pm 1.4\text{nm}$. Fehler sind auch durch die Halterung und die Welligkeit der Folie zu erwarten. Im Anschluss an die hier beschriebene Untersuchung der Folien wurde für die weiteren Messungen an BL1 aufgrund des niedrigeren w_{rms} und der ausreichenden Abschwächung von $8\mu\text{J}$ auf $0.18\mu\text{J}$ der 137nm Dicke Al-Filter gewählt.

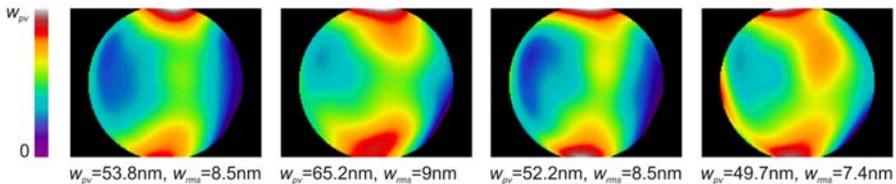


Abbildung 5.4: Wellenfronten von FLASH-Einzelpulsen an BL1 ($a = 2.72\text{mm}$). w_{pv} und w_{rms} schwanken ca. 10% um die Mittelwerte [16].

5.1.5 Vergleich des ersten und des zweiten Sensors

Die Sensoren wurden innerhalb einer Schicht an BL2 nach dem in Abschnitt 5.1.2 beschriebenen Verfahren mit einer Lochblende kalibriert. Zunächst wurde der erste Sensor im direkten Strahl ($z_0 = -1033\text{mm}$) positioniert und die Wellenfront gemessen, dann nach einem Umbau der zweite Sensor ($z_0 = -1097\text{mm}$). Um ein stabiles Signal zu erhalten wurde über 100 Aufnahmen gemittelt. Die Intensität des Strahls ($\lambda = 13.4\text{nm}$) wurde mit dem Gasabschwächer (Xe) reduziert.

Abbildung 5.6 zeigt in der oberen Zeile das Intensitätsprofil des Strahls (links), die Wellenfrontaberrationen (Mitte) und die Aberrationen abzüglich Astigmatismus (rechts). Unter den Grafiken ist jeweils w_{pv} und w_{rms} angegeben und in der zweiten Zeile die

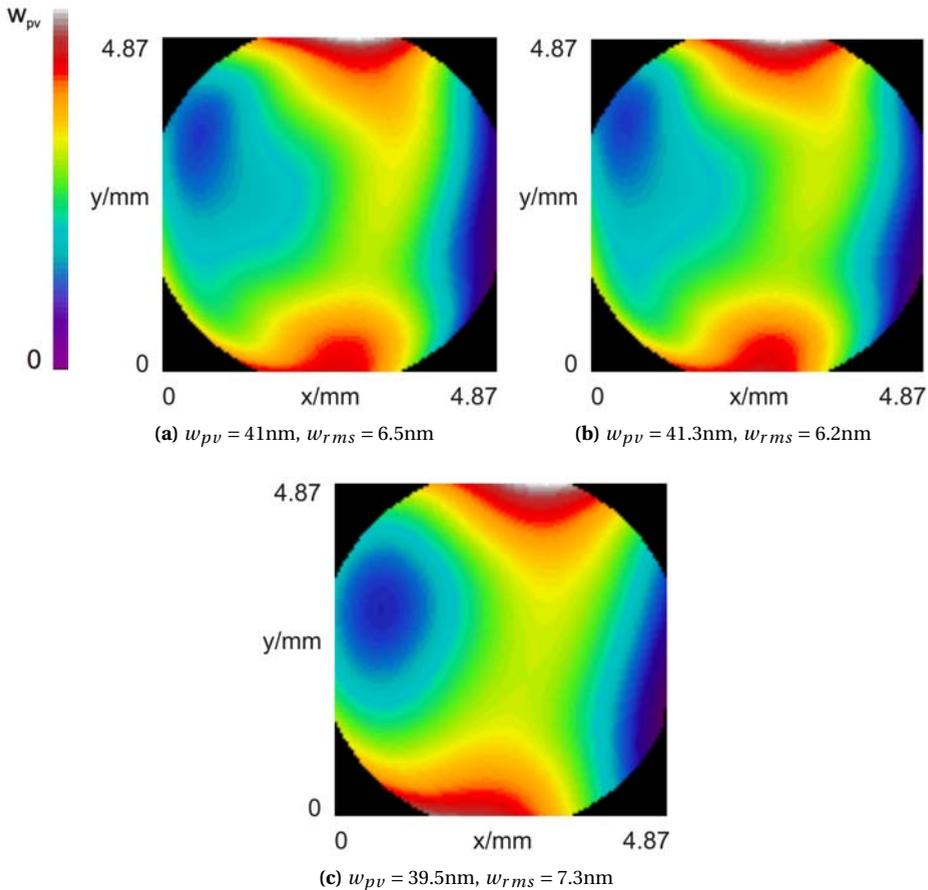


Abbildung 5.5: Wellenfrontaberrationen für zwei unterschiedliche Folien aus Aluminium mit 137nm Dicke (a,b) und 200nm Dicke (c) (Mittel über 16 Pulse, $a = 2.44\text{mm}$, 37 Zernikepolynome) [16].

entsprechenden Ergebnisse der Messung mit dem ersten Sensor. Für beide Sensoren ist der Astigmatismus die dominierende Aberration. Für die höheren Aberrationen misst der zweite Sensor jedoch nur halb so hohe Werte, weshalb $M_x^2 = 2.5$ und $M_y^2 = 1.6$ gegenüber $M_x^2 = 6.42$ und $M_y^2 = 4.45$ mit dem ersten Sensor bestimmt worden ist, obwohl die Messung mit dem ersten Sensor sogar ein etwas kleineres w_{rms} liefert. Wie im Zusammenhang mit der Kalibrierung (Abschnitt 5.1.2) und der Konstruktion der Sensoren (Kapitel 4) erläutert, ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis des zweiten Sensors gegenüber dem ersten verbessert worden. Dadurch können vor allem die höheren Terme, die einen starken Einfluss auf die Bestimmung von M^2 und Fokusbereich haben, genauer bestimmt werden. Vergleich der Wellenfronten zeigt zudem, dass die Abweichungen zwischen den Sensoren größer sind als die Wiederholgenauigkeit. Um die absolute Genauigkeit der Strahlparameterbestimmung besser einschätzen zu kön-

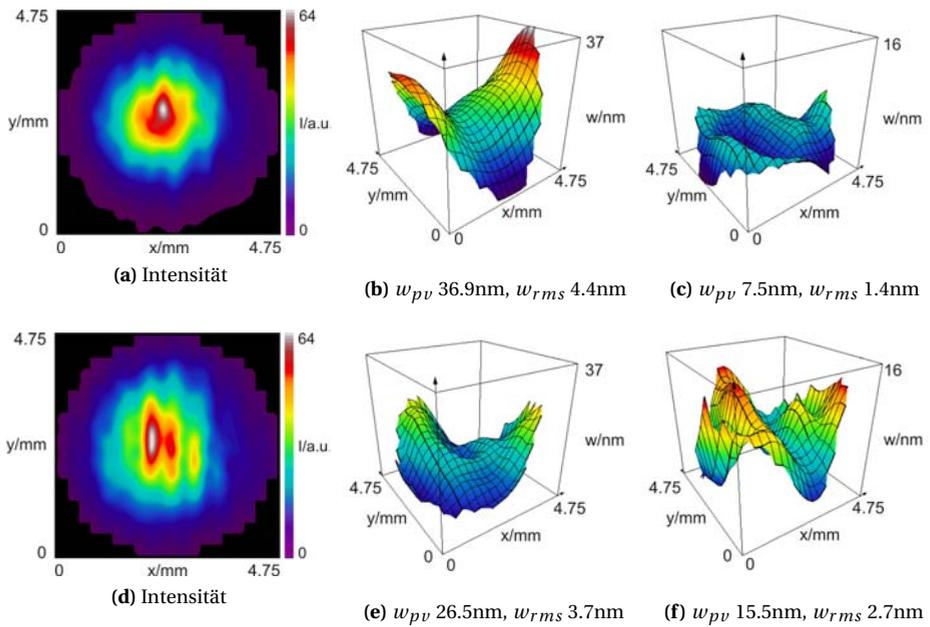


Abbildung 5.6: Vergleich der Sensoren im fokussierten Strahl an BL2. Die obere Zeile wurde mit dem zweiten Sensor gemessen, die untere mit dem ersten. Links ist jeweils das Intensitätsprofil gezeigt (Interpolation bikubische Splines), in der Mitte die Wellenfrontaberrationen, rechts die Aberrationen ohne Astigmatismus.

nen, wurde der erste Sensor gegen eine Strahlparametermessung aus Strahlprofilen nach ISO 11146 getestet (Kapitel 6).

5.1.6 Abschätzung des Kohärenzeinflusses

Der Einfluss der Strahlparameter wird hier angelehnt an das Gauß-Schell-Modell (GSM) (2.21) abgeschätzt, indem der (reellwertige) Kohärenzgrad $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp(-(x_1 - x_2)^2 / (2q_x^2 \sigma_x^2) - (y_1 - y_2)^2 / (2q_y^2 \sigma_y^2))$ in den Ausdruck (4.22) für das zweite Fernfeldmoment eingesetzt wird. Intensität und Phase werden den Messwerten des Hartmann-Sensors entnommen. Es folgt mit Gleichung (4.22)

$$\langle u^2 \rangle = \langle u^2 \rangle_{IHS} + \frac{1}{k^2 q_x^2 \sigma_x^2} \quad (5.2)$$

$$\langle v^2 \rangle = \langle v^2 \rangle_{IHS} + \frac{1}{k^2 q_y^2 \sigma_y^2} \quad (5.3)$$

wobei die Parameter q_x, q_y die Breite des Kohärenzgrades relativ zur Breite Strahlprofils angeben. Alle weiteren Momente sind unverändert und die Strahlparameter ändern sich entsprechend. Für M_i^2 ($i = (x, y)$) gilt

$$M_i^2 = \sqrt{\left(M_{i,IHS}^2\right)^2 + 4/q_i^2} \quad (5.4)$$

und es folgen zwei wichtige Aussagen. Erstens können die Kohärenzeffekte nicht durch die Wahl einer geeigneten Messebene eliminiert werden, denn M_i^2 ist propagationsinvariant und q_x ebenfalls, solange sich der Strahl wie ein Gauß-Schell-Strahl verhält. Zweitens folgt, dass der Einfluss der transversalen Kohärenz vernachlässigt werden kann, solange $M_{i,IHS}^2 \gg 2/q_x$ gilt.

Hier wird der Mittelwert der drei Rekonstruktionen der Wignerfunktion, $q_x = 0.61$ bzw. $q_y = 0.79$, verwendet (Tabelle 6.2). Die korrigierten Strahlparameter des Strahls an BL2 ohne bzw. mit Ellipsoidspiegel und des Strahls an BL1 sind in den Tabellen 5.2, 5.3 und 5.4 aufgelistet. Die Messungen sind in den Abschnitten 5.2, 5.3.1 und 5.3.3 beschrieben.

Während Strahldurchmesser, w_{pv} und w_{rms} als direkt aus Strahlprofil und Wellenfront in der Sensorebene abgeleitete Größen unveränderlich sind, können sich M^2 und der Taillendurchmesser fast auf das Doppelte vergrößern. Der relative Einfluss der partiellen Kohärenz unterscheidet sich zwischen den einzelnen Messungen, der Grund liegt in der Beziehung (5.4). Im Allgemeinen ist der Einfluss des transversalen Kohärenzgrades auf die Propagationseigenschaften des FLASH-Strahls nach dieser Abschätzung nicht vernachlässigbar.

5.2 Messung ohne Fokussierspiegel

Der zweite Hartmann-Sensor wurde November 2010 (nach dem Ausbau des FEL, siehe Tabelle 3.2) an Beamline BL2 ($\lambda = 7\text{nm}$, $140\mu\text{J}$) in ca. 75.62m Abstand von der Quelle auf einem Dreibein montiert. Als Quellpunkt wird der objektseitige Brennpunkt des

Ellipsoidspiegels angenommen. Für die hier beschriebene Messung wurde der Spiegel jedoch aus dem Strahlengang gefahren. Die Pulsenergie wurde durch den Gasabschwächer (Krypton) reduziert. Dabei wird die Energie der dritten Harmonischen etwa fünffach überhöht [74, 120]. Der Sensor wurde wenige Tage vor der Messung mit der Aufnahme 5.2a wie dort beschrieben kalibriert.

Zuerst wurde der Kamera-Offset auf 3.7% der Bittiefe eingestellt und dann wurden alle Subaperturen aus dem 33 x 24 Raster, die keine Intensität enthielten, gelöscht. Die Wellenfront wurde auf einem Gebiet mit Auswerteradius $a = 4.24\text{mm}$ durch modale Rekonstruktion mit den 37 Zernikepolynomen aus Anhang A.2 berechnet. Wegen des großen Strahlprofils (entsprechend großem a) ist in dieser Messung der Kreis, auf dem die Zernikepolynome definiert sind, nicht komplett durch gemessene Wellenfrontgradienten und Intensitäten abgedeckt. Außerdem ist das Auswertgebiet etwas zu klein.

Die Abbildung 5.7 zeigt zwei Einzelpulse, oben die Intensitätsprofile (interpoliert mit bikubischen Splines) und darunter die zugehörigen Wellenfronten. Über eine Stichprobe von 100 Pulsen war die Strahlagestabilität (Standardabweichung der ersten Ortsmomente (4.8)) der Einzelpulse $\pm 5.6\%$ des Strahldurchmessers in der Sensorebene und die Schwankung der Intensität 43%. Der Strahldurchmesser (2.38) schwankte um $\pm 5\%$ (Standardabweichung) von Puls zu Puls und war im Mittel $6\text{mm} \times 4.5\text{mm}$.

Das Strahlprofil zeigt eine von Puls zu Puls erhaltene horizontale Intensitätsmodulation, die durch Formfehler der Spiegel hervorgerufen sein kann (vergleiche das Strahlprofil an LCLS in Abbildung 7.2). Die ovale Form und der dominierende Astigmatismus der Wellenfrontaberrationen sind über die Einzelpulse stabil.

Die gute Strahlqualität mit einer recht glatten Wellenfront ($w_{rms} = 0.7\text{nm}$) und einem nicht zu stark strukturierten Strahlprofil drückt sich im mittleren M^2 von 1.15 aus. Der FLASH-Strahl kann in guter Näherung einfach-astigmatisch beschrieben werden, denn das einfach-astigmatisch berechnete M^2 ($M^2 = \sqrt{M_x^2 M_y^2}$) weicht weniger als 1% vom vierdimensional berechneten ab. Die Strahlparameter sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst, der angegebene Fehler ist die Standardabweichung über die Parameter der Einzelpulse (Stichprobe 20 Pulse). In der zweiten Spalte sind die Strahlparameter angegeben, die folgen, wenn dieselben Kamera-Aufnahmen mit je einem FEL-Puls erst gemittelt werden und danach die Wellenfront rekonstruiert wird. Die Irregularität der Wellenfront, w_{rms} und M^2 werden dann systematisch unterschätzt, da die Strahlqualität eines mittleren Pulses besser ist als die mittlere Strahlqualität eines Einzelpulses. Dennoch kann es nützlich sein, erst einige Aufnahmen zu mitteln um ein stabiles Signal zu erhalten, etwa wenn Optiken justiert werden. Wie aus der Tabelle 5.2 ersichtlich, sind die Strahlparameter aus den gemittelten Aufnahmen dennoch eine in vielen Fällen ausreichende Näherung.

Zusätzlich geben die in Tabelle 5.2 unter der Spalte „GSM“ (Gauß-Schell-Modell) zusammengefassten Werte eine Abschätzung der nach dem in Abschnitt 5.1.6 beschriebenen Verfahren um Kohärenzeffekte korrigierten Strahlparameter. Wie man sieht, können die Korrekturen für einzelne Werte wie M^2 und d_0 mehr als das Doppelte betragen. Nach Gleichung (5.4) und dem gemessenen $M^2 = 1.15$ liegt der Grund darin, dass die Strahlqualität in Bezug auf Intensität und Phase recht gut und daher der relative Einfluss der partiellen Kohärenz hoch ist.

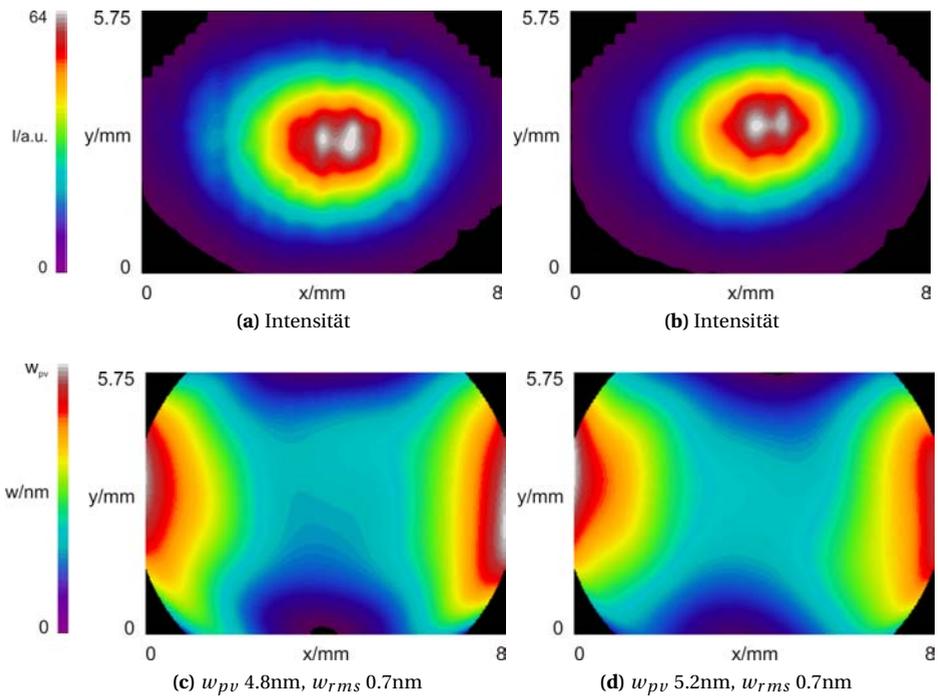


Abbildung 5.7: Interpolierte Intensitätsprofile (a,b) zweier unfokussierter Einzelpulse an BL2 und ihre Wellenfrontaberrationen (c,d).

Strahlparameter	Einzelpulse	20 Pulse	
		vollkohärent	GSM
Strahldurchmesser [mm] x	6 ± 0.2	6	
Strahldurchmesser [mm] y	4.4 ± 0.1	4.4	
w_{pv} [nm]	5.3 ± 0.69	4.8	
w_{rms} [nm]	0.67 ± 0.09	0.6	
M^2	1.15 ± 0.08	1.1	3.5
M_x^2	1.23 ± 0.1	1.1	2.7
M_y^2	1.1 ± 0.1	1	3.1
Divergenz x [μ rad]	55 ± 2	55	55
Divergenz y [μ rad]	44 ± 2	44	44
Rayleighlänge x [mm]	3760 ± 484	3372	10169
Rayleighlänge y [mm]	5090 ± 731	4716	12454
Lage Strahltille x [m]	-109.2 ± 0.9	-109.4	-108.6
Lage Strahltille y [m]	-99.2 ± 1.4	-99.7	-98.3
Durchm. Strahltille x [μ m]	200 ± 20	185	559
Durchm. Strahltille y [μ m]	223 ± 25	207	551

Tabelle 5.2: Strahlparameter an BL2, November 2010, im unfokussierten Strahl bei $\lambda = 7 \text{ nm}$, bestimmt mit dem zweiten Hartmann-Sensor. Angegeben sind die Mittelwerte über 20 Einzelpulse und die Strahlparameter, die aus 20 gemittelten Kamera-Aufnahmen mit je einem Puls berechnet wurden. Die Spalte „vollkohärent“ geht von einem vollkohärenten Strahl aus, „GSM“ (Gauß-Schell-Modell) schätzt die Strahlparameter bei partieller Kohärenz ab.

In der Veröffentlichung [1] wurde bei $\lambda = 13.7\text{nm}$ und Pulsenergie $E_p = 40\mu\text{J}$ die Quellgröße $160\mu\text{m}$ und Divergenz $90 \pm 10\mu\text{rad}$ (beide FWHM) gemessen. Das Strahlprofil folgte dabei näherungsweise einer Gaußfunktion und die entsprechenden auf 4σ bezogenen Werte lauten: Quellgröße $272\mu\text{m}$, Divergenz $153\mu\text{rad}$ und $M^2 = 2.4$. Alle Werte außer der Divergenz liegen zwischen den aus der Hartmann-Messung bestimmten Parametern bei Vernachlässigung der Kohärenz und der Abschätzung mittels GSM. Nimmt man an, dass sich Strahlqualität und Quellgröße nicht bzw. nur geringfügig mit der Wellenlänge ändern, dann ist die Divergenz proportional zur Wellenlänge. Umgerechnet auf $\lambda = 7\text{nm}$ folgt $\theta = 78\mu\text{rad}$. Die in [133] gemessene Divergenz von $130\mu\text{m}$ (FWHM) bei $\lambda = 32\text{nm}$ und $E_p = 10\mu\text{J}$ entspricht nach den gleichen Überlegungen $\theta = 48\mu\text{m}$ und entspricht gerade dem Messergebnis des Hartmann-Sensors.

5.3 Spiegeljustage und Strahlparameter mit fokussierender Optik

5.3.1 Beamline BL2 November 2010

Der zweite Hartmann-Sensor wurde November 2010 1097mm hinter der erwarteten Fokusbahn, die sich in 2m Abstand zum Ellipsoidspiegel befindet, auf einem Dreibein montiert. Die Pulsenergie des FLASH-Strahls von $50\mu\text{J}$ bei $\lambda = 13.4\text{nm}$ wurde mit dem Gasabschwächer (Xe) reduziert. Die folgenden Messungen fanden direkt nach den in Abschnitt 5.2 beschriebenen Messungen ohne Ellipsoidspiegel statt und es wurde dieselbe Referenzaufnahme verwendet. In der Messebene des Sensors war die Strahlstabilität mit und ohne Fokussierspiegel identisch.

Der Spiegel ist lateral verfahrbar und kann bezogen auf die Spiegelfläche gegiert („Yaw“-Winkel) und genickt („Pitch“-Winkel) werden. Der Spiegel war bereits vor der Hartmann-Messung mit einem sichtbaren Laser vorjustiert worden, indem der Spiegel so eingestellt wurde, dass die kreisrunde Form des Lasers nach Reflexion erhalten blieb. Yaw und Pitch wurden mit dem Hartmann-Sensor optimiert. Dafür wurden die Wellenfronten auf einem kreisförmigen Auswertebereich, einbeschrieben in ein Raster aus 19×18 Subaperturen, modal mit 37 Zernike-Polynomen (Tabelle A.2) rekonstruiert. Um eine stabile mittlere Wellenfront unabhängig von den Puls-zu-Puls-Schwankungen des Strahls zu erhalten, wurden jeweils 20 Kamera-Aufnahmen gemittelt bevor die Wellenfront rekonstruiert wurde.

Abbildung 5.8 zeigt die Wellenfronten für verschiedene Stellungen des Spiegels. Unterhalb der Wellenfronten sind die jeweiligen Werte für w_{pv} und w_{rms} in Nanometern angegeben. Wie zu erkennen, ist der Astigmatismus der dominierende Aberrationsterm. Die Wellenfront in der Ausgangsposition ist rot umrandet. Zunächst wurde der Astigmatismus durch Drehen des Spiegels um $30\mu\text{rad}$ um den Yaw-Winkel ausgerichtet und reduziert, sodass er entlang der Koordinatenachsen orientiert war (Koeffizient a_{221} minimal). Dann wurde der Betrag des Astigmatismus minimiert (a_{220} und a_{221} minimal), indem der Spiegel $171\mu\text{rad}$ um die Pitch-Achse gedreht wurde. Anhand der Wellenfronten für den kleinsten bzw. größten Pitch-Winkel erkennt man unmittelbar den Vorzeichenwechsel von a_{220} . An der Endposition des Spiegels (grün umrandet) liegt gerade der Nulldurchgang.

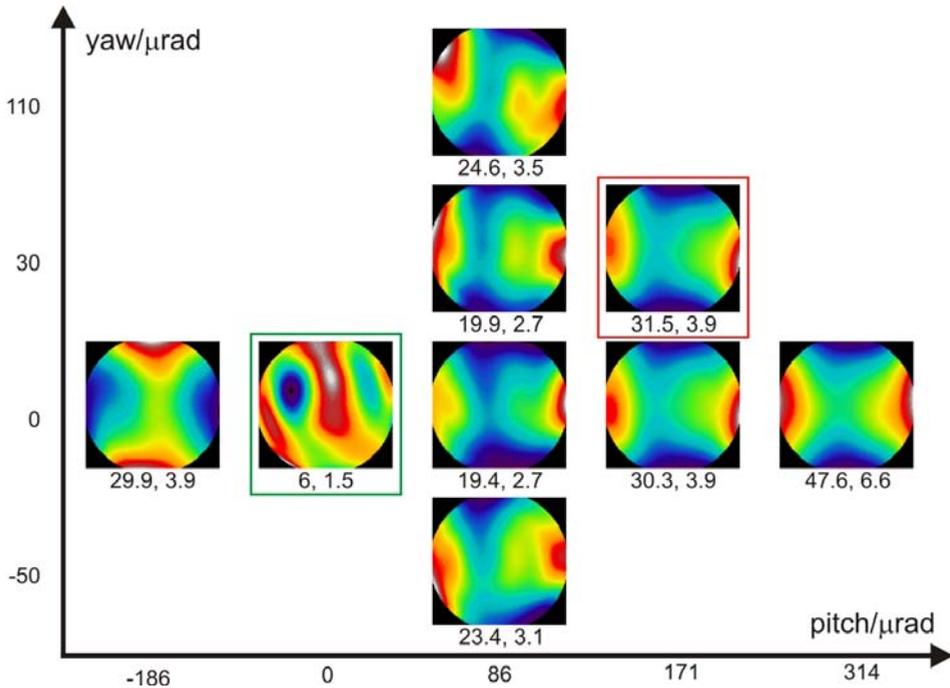


Abbildung 5.8: Wellenfronten für verschiedene Positionen des Ellipsoidspiegels an BL2 (pitch/yaw-Skala nicht linear). Unter jeder Wellenfront ist w_{pv} und w_{rms} in Nanometern angegeben. Pitch- und Yaw-Winkel wurden von der Ausgangsposition (rot umrandet) zur Endposition (grün) um $171\mu\text{rad}$ bzw. $30\mu\text{rad}$ verfahren, w_{rms} dabei um einen Faktor 2.6 verringert.

Nach der Maréchal-Approximation an den Strehl-Wert (siehe Abschnitt 2.3.2) ist die optimale Spiegelposition mit der höchsten Energiedichte im Fokus durch den minimalen Wert für w_{rms} gekennzeichnet. Durch die Justage konnte dieser um einen Faktor 2.6 von 3.9nm auf 1.5nm reduziert werden und w_{pv} um einen Faktor 5.25 von 31.5nm auf 6nm .

Die berechneten Strahlparameter vor und nach der Justage des Ellipsoidspiegels sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Die Lage der Strahltaile stimmt auf ca. 0.5% mit dem geometrisch bestimmten Abstand des Sensors vom Bild der Quelle überein. Die astigmatistische Differenz (Differenz der Linienfoki in x - und y -Richtung) wurde von 14mm auf 1mm reduziert. Der M^2 -Faktor, also auch der Durchmesser der Strahltaile, ist in Relation zur erheblichen Verbesserung von w_{pv} und w_{rms} nur wenig durch die Justage beeinflusst. Dies erklärt sich dadurch, dass der die Wellenfrontaberrationen dominierende Astigmatismus a_{220} unter 0° die Fokussierbarkeit in x und y nicht verringert. Wie oben beschrieben, ist der FLASH-Strahl in guter Näherung einfach-astigmatistisch, mit horizontal und vertikal ausgerichteten Hauptachsen. Nach Justage des Ellipsoidspiegels ist diese Eigenschaft auch im fokussierten Strahl gut erhalten. Die Abweichung des

Strahlparameter	vor Justage	nach Justage	
		vollkohärent	GSM
Strahldurchmesser x [mm]	3.283	2.949	
Strahldurchmesser y [mm]	3.224	3.088	
w_{pv} [nm]	31.5	6	
w_{rms} [nm]	3.9	1.5	
M^2	1.7	1.8	3.4
M_x^2	2.2	2.4	4
M_y^2	1.5	1.4	2.9
Divergenz x [mrad]	3.0	2.7	2.7
Divergenz y [mrad]	2.9	2.8	2.8
Divergenz global [mrad]	3	2.7	2.7
Rayleighlänge x [mm]	4.2	5.4	9.3
Rayleighlänge y [mm]	2.8	2.9	6.1
Rayleighlänge global [mm]	7.9	4.2	7.8
Lage Strahltaile x [mm]	-1109	-1101	-1101
Lage Strahltaile y [mm]	-1095	-1102	-1102
Lage Strahltaile global [mm]	-1102	-1101	-1101
Durchm. Strahltaile x [μm]	12.4	14.5	24.8
Durchm. Strahltaile y [μm]	8.2	8.1	17
Durchm. Strahltaile global [μm]	23.4	11.9	21.4

Tabelle 5.3: Strahlparameter vor und nach der Justage des Spiegels mit dem zweiten Sensor an BL2 (November 2010, Rekonstruktion über 20 gemittelte Aufnahmen). Die Spalte „GSM“ gibt Abschätzungen für die Strahlparameter bei Verwendung einer Kohärenzfunktion nach dem Gauß-Schell-Modell, wie beschrieben in Abschnitt 5.1.6 (nur veränderliche Parameter), an.

einfach-astigmatisch berechneten M^2 ($M^2 = \sqrt{M_x^2 M_y^2}$) vom eigentlichen Wert sinkt von 7% vor der Justage auf unter 1%, die auch im unfokussierten Strahl festgestellte Differenz. Diese Ergebnisse unterstützen die in Kapitel 6 angenommene Separierbarkeit des Strahls.

Das deutlich verbesserte w_{rms} resultiert nicht in reduzierten Taillendurchmessern in x - und y -Richtung, da im wesentlichen der Astigmatismus eliminiert wurde. Der globale Taillendurchmesser wurde hingegen auf etwa die Hälfte verkleinert. Hier wird deutlich, wie dieser die Information über die Durchmesser und Lagen der Strahltaile in x und y auf natürliche Weise verbindet.

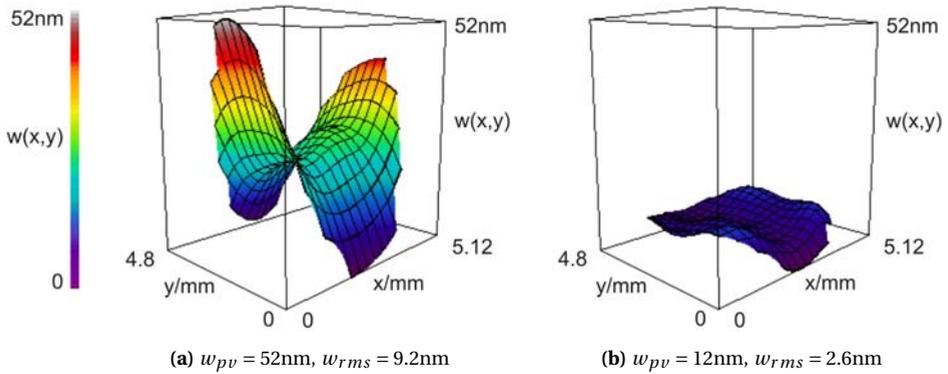


Abbildung 5.9: Wellenfrontaberrationen vor (a) und nach (b) der Justage des Ellipsoidspiegels an BL2 mit dem ersten Sensor (Auswerteradius $a = 2.4\text{mm}$, ein Pulszug à 30 Pulse je Aufnahme).

5.3.2 Beamline BL2 Juni 2009

Zur Justage des Ellipsoidspiegels ($f = 2\text{m}$) im Juni 2009 wurde Hartmann-Sensor 1 an Position C (siehe Grafik 5.1) ca. 1349mm hinter dem Fokus des Ellipsoidspiegels ($f = 2\text{m}$) freitragend (d.h. nur über die Schraubverbindung am Flansch gehalten) an eine Vakuumkammer angebracht. Der Strahl ($\lambda = 25.9\text{nm}$) wurde über einen Chrombeschichteten Planspiegel unter 45° abgeschwächt und auf den Sensor gelenkt. Die Rauigkeit des Spiegels ist ca. 1\AA , die Formabweichung $\lambda/30 - \lambda/60$ bei 633nm über eine Apertur von 50mm , von der jedoch nur etwa 3mm ausgeleuchtet wurden. Jede Aufnahme des Sensors enthält einen Pulszug mit 30 Einzelpulsen à $10\mu\text{J}$, sodass die bestimmten mittleren Wellenfronten ($a = 2.39\text{mm}$) stabil sind. Der Fokussierspiegel war bereits vor den Messungen nach dem in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen Verfahren vorjustiert worden.

Für die Hartmann-Messung an BL2 wurde die in Abschnitt 5.1.4 beschriebene Kalibrationsaufnahme von BL1 (März 2009) verwendet. Wie in Abbildung 5.9a zu erkennen, sind die Wellenfrontaberrationen von einem Astigmatismus unter 0° dominiert.

Die Justage des Ellipsoidspiegels wurde analog zum in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen Vorgehen der Messung vom November 2010 durchgeführt. Dabei wurde der Spiegel von der Anfangs- zur Endposition um insgesamt $290\mu\text{rad}$ genickt und $60\mu\text{rad}$ gegiert. Wie in Abbildung 5.9 zu sehen, konnte die Irregularität w_{pv} von 52nm auf 12nm , weniger als ein Viertel, reduziert werden. w_{rms} betrug nach der Justage 2.6nm , weniger als ein Drittel des anfänglichen Wertes von 9.2nm .

Die verbleibende Wellenfrontrauigkeit ist größer als der später, November 2010, erzielte Wert. Ein Grund kann die verbesserte Genauigkeit des zweiten Sensors sein, jedoch auch der Ablenkspiegel. Die Eigenschaften des Strahls können sich ebenfalls verändert haben, da FLASH in der Zeit wischen den Messungen ausgebaut wurde.

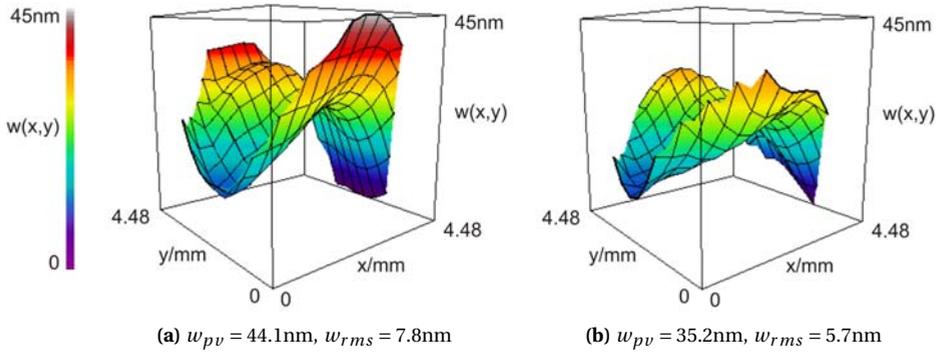


Abbildung 5.10: Wellenfront vor (a) und nach (b) der Justage des Toroidspiegels an BL1 mit dem ersten Sensor (Auswerteradius $a = 2.23\text{mm}$, Mittelung über vier Aufnahmen mit je einem Puls).

Nach Justage des Spiegels wurde der Sensor an Position B umgesetzt, 4817mm hinter dem Fokus, um die Strahlparameter des Hartmann-Sensors mit Propagationsmessungen nach ISO 11146 zu vergleichen. Eine Lochblende (3mm Durchmesser, 3486mm vor dem Ellipsoidspiegel) definierte bei dieser Messung die Austrittspupille der Beamline. Der Strahl ($\lambda = 13.8\text{nm}$, $E_p = 10\mu\text{J}$) wurde mit einer 200nm dicken Al-Folie um den Faktor 200 abgeschwächt.

Im Einzelpuls wurde $w_{pv} = 10.6 \pm 1.6\text{nm}$ und $w_{rms} = 1.6 \pm 0.2\text{nm}$ bestimmt ($a = 2.25\text{mm}$) [15]. Die vollständigen Strahlparameter sind in Tabelle 6.1 zusammen mit den Ergebnissen aus der Propagationsmessung (Kapitel 6) aufgeführt und verglichen.

5.3.3 Beamline BL1 März 2009

Die Wahl der Messebene, Kalibrierung des ersten Sensors durch eine Lochblende sowie die Abschwächung des Strahls sind hier wie in Abschnitt 5.1.4 beschrieben. Unmittelbar nach Aufnahme der Referenzwellenfront und vor Messung der Strahlparameter wurde der Toroidspiegel ($f = 10\text{m}$) justiert. Ein Toroid kann als lokale Approximation an ein Ellipsoid betrachtet werden (Abschnitt 3.1.2). Daher läuft die Justageprozedur ganz analog zu der bereits in Abschnitt 5.3.1 für den Ellipsoidspiegel an BL2 beschriebenen. Um den Einfluss der Strahlschwankungen zu verringern wurde die Wellenfront über vier gemittelte Kamera-Aufnahmen mit je einem FEL-Puls berechnet. Dabei konnte w_{pv} um 20% von 44.1nm auf 35.2nm und w_{rms} um 27% von 7.8nm auf 5.7nm reduziert werden ($a = 2.23\text{mm}$) [16]. Die Wellenfronten zu Beginn und am Ende des Justageprozesses sind in Abbildung 5.10 gezeigt.

Nach der Justage wurde die Wellenfront für 75 Einzelpulse ausgewertet. Die Strahlparameter sind in Tabelle 5.4 zusammengefasst, die angegebenen Fehler entsprechen der Standardabweichung. In der oberen Hälfte enthalten die Spalten x und y die Parameter nach (2.38). Darunter stehen die Parameter, die nicht von der Koordinatenrichtung abhängen, berechnet nach den Ausdrücken (4.17-4.20).

Strahlparameter	vollkohärent		GSM	
	x	y	x	y
d_i [mm]	4 ± 0.2	4.3 ± 0.3		
M_i^2	8.8 ± 1.4	6.8 ± 0.9	9.4 ± 1.3	7.3 ± 0.9
θ_i [mrad]	1.09 ± 0.05	1.13 ± 0.04	1.09 ± 0.05	1.13 ± 0.04
z_{Ri} [mm]	132 ± 19	96 ± 15	141 ± 18	102 ± 15
z_{0i} [mm]	-3656 ± 34	-3824 ± 32	-3655 ± 34	-3823 ± 32
d_{0i} [μm]	144 ± 11	108 ± 15	154 ± 19	115 ± 14
w_{pv} [nm]	58.4 ± 5.9			
w_{rms} [nm]	8.5 ± 1			
M^2	7.7 ± 0.9		8.3 ± 0.84	
θ [mrad]	1.11 ± 0.04		1.11 ± 0.04	
z_R [mm]	144 ± 11		150 ± 11	
z_0 [mm]	-3743 ± 29		-3743 ± 29	
d_0 [μm]	159 ± 11		166 ± 10	

Tabelle 5.4: Strahldurchmesser d , Beugungsmaßzahl M^2 , Divergenz θ , Rayleighlänge z_R , Tailenlage z_0 und -durchmesser d_0 an Beamline BL1 ($\lambda=13.5\text{nm}$) ($i = x, y$). Die Werte in der Spalte „GSM“ geben eine Abschätzung der Strahlparameter unter Berücksichtigung der transversalen Kohärenz an (siehe Abschnitt 5.1.6) [16].

Die Fokusgröße beträgt hier $159\mu\text{m}$, entsprechend $94\mu\text{m}$ FWHM für einen Gaußstrahl mit gleichem zweiten Moment. Die Fokusgröße liegt nahe des Sollwerts $d_0 = 100\mu\text{m}$ (FWHM) des Spiegels [11]. Der Fokusdurchmesser an BL1 ist ein Vielfaches des Beugungslimits $d_0/M^2 = 21\mu\text{m}$. Aufgrund der größeren Wellenfrontaberrationen und des resultierenden größeren M^2 ist die relative Korrektur der Strahlparameter durch die partielle Kohärenz deutlich geringer als an BL2 (siehe Gleichung 5.4).

6 Strahlparameterbestimmung aus Strahlprofilen

Durch Messung der Strahlprofile an mehreren z -Positionen entlang der Strahlachse wurden die Propagationseigenschaften des Strahls Juni 2009 an Beamline BL2 untersucht. Die Strahlparameter wurden durch Ausgleichsrechnung aus dem hyperbolischen Propagationsgesetz des Strahldurchmessers bestimmt und durch eine Rekonstruktion der Wignerfunktion der Kohärenzgrad und Modengehalt des Strahls bestimmt [147].

6.1 Experimenteller Aufbau

An Beamline BL2 (Ellipsoidspiegel $f = 2\text{m}$, $\lambda = 25.9\text{nm}$) wurden Strahlprofile von Einzelpulsen im Bereich 2-3 Rayleighlängen z_R auf jeder Seite der Strahltaile gemessen. Dazu wurde ein im Vakuum angebrachter Szintillator ($\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S}:\text{Tb}$, „P43“, Quarzglas-Substrat) und eine PMMA-Probe (Polymethylmetacrylat, „Plexiglas“, Dicke 2mm) mit einem z -Achsen-Manipulator entlang der Strahlachse verfahren (Position A in Grafik 5.1). Die Austrittspupille der Beamline wurde durch eine 3mm Lochblende, 3486mm vor dem Ellipsoidspiegel, vorgegeben.

P43 wurde ausgewählt, nachdem am LLG bei 13.5nm Wellenlänge eine 2.3-fach höhere Energieeffizienz der EUV-Kamera bei $F = 5.7\text{mJ}/\text{cm}^2$ mit P43-Schicht gegenüber einem $200\mu\text{m}$ dicken Ce:YAG-Kristall (Cer-dotiertes Yttrium-Aluminium Granat, 0.2% Ce bezogen auf Teilchenzahl, Marketeck International) gemessen wurde. Dazu wurde die Strahlung einer Laser-Plasma-Quelle (Goldtarget) mit einem Schwarzschildobjektiv auf die Proben fokussiert [151].

Die EUV-Kamera besteht aus einem Szintillator, der mit einem 10-fach vergrößernden Mikroskop mit langem Arbeitsabstand durch den Fensterflansch auf einen CCD-Chip abgebildet wurde, zu sehen in Abbildung 6.1 (Kamera Lumenera LM165, Pixelbreite $6.45\mu\text{m}$, 12 Bit). Die Auflösung des Mikroskops ($2\text{-}4\mu\text{m}$) und der P43-Schicht (ca. $3\text{-}4\mu\text{m}$ Linienbreite, Herstellerangabe: Proxytronic) waren vergleichbar. Vor der eigentlichen Messung wurde die Nichtlinearität des Szintillators untersucht, indem der maximale Pixel-Zählwert der Kamera für diverse Filterkombinationen (Al 100.9nm, Nb 202.1nm, Al 200nm, Si 273.9nm, Zr 289nm, Zr 191.5nm) aufgezeichnet wurde. Eine Ausgleichsrechnung (Origin) des gemessenen Signals und der berechneten Fluenz F mit exponentieller Abnahme ($C(1 - \exp[-F/F_0])$) und den freien Parametern C und F_0 liefert $F_0 = 5\text{mJ}/\text{cm}^2$. Bei der späteren Messung der Strahlprofile wurde der Strahl durch eine 202nm dicke Niob-Folie abgeschwächt, sodass die maximale Fluenz im Fokus etwa $4\text{mJ}/\text{cm}^2$ betrug. Die Pixel-Zählwerte wurden mit der Umkehrfunktion der angepassten Funktion korrigiert.

Die PMMA-Probe wurde durch einzelne, nicht abgeschwächte Pulse bei $F < 500\text{mJ}/\text{cm}^2$ bestrahlt und dabei Material ablatiert. Dabei wurde jede Stelle der Probe nur einmal bestrahlt. Bis auf unvermeidliche Fluktuationen wurde die Pulsenergie in beiden Messungen für alle z -Positionen konstant gehalten.

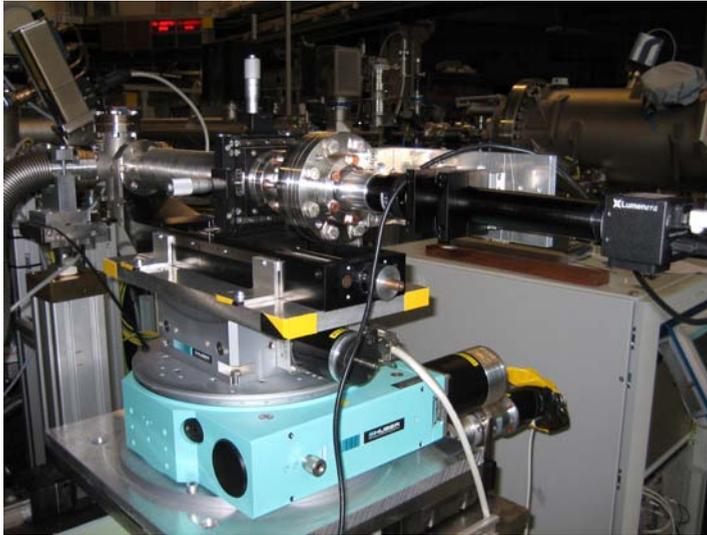


Abbildung 6.1: Entlang der Strahlachse verfahrbare EUV-Kamera bestehend aus einem Szintillator im Vakuum, einem Mikroskop mit langem Arbeitsabstand und einer CCD Kamera.

6.2 Bestimmung der Strahlparameter nach ISO 11146

Das Verfahren zur Charakterisierung von Laserstrahlen nach ISO 11146 beruht auf dem quadratischen Propagationsverhalten der zweiten Ortsmomente und ist in Abschnitt 2.2.3 näher beschrieben. Das Verfahren wurde an die Anforderungen des Spektralbereichs und der FLASH-Beamline angepasst: ± 2 -3 Rayleighlängen Fahrweg in z -Richtung, ausreichende laterale Auflösung für einen erwarteten Fokusbereich von etwa $20\mu\text{m}$ FWHM, P43 bzw. PMMA zur Messung des Fluenzprofils.

6.2.1 EUV-Kamera

In Abbildung 6.2 sind die Strahlprofile einzelner Pulse an fünf unterschiedlichen z -Positionen dargestellt. $z = 0$ entspricht hier der Mitte zwischen den Strahltaillen für x und y . Die Farbskala entspricht der maximalen Dynamik der Kamera, wobei die Aufnahmen außerhalb der Strahltaille zur besseren Darstellung um das Doppelte bzw. Vierfache angehoben wurden. Im Fokus wurde etwa 75% der Sättigungsfluenz der CCD erreicht. Der Kamera-Offset wurde auf 0.7% der Dynamik eingestellt. Wie bei den Messungen mit dem Hartmannsensor (Abbildungen 5.6 und 5.7) fällt die horizontale Modulation der Intensität auf, die sich hier außerhalb der Strahltaille entwickelt.

An 32 z -Positionen (Schrittweite 4mm) wurde für je 100 Aufnahmen das zweite Ortsmoment der Intensitätsverteilung aus den Pixel-Zählwerten berechnet (Abschnitt

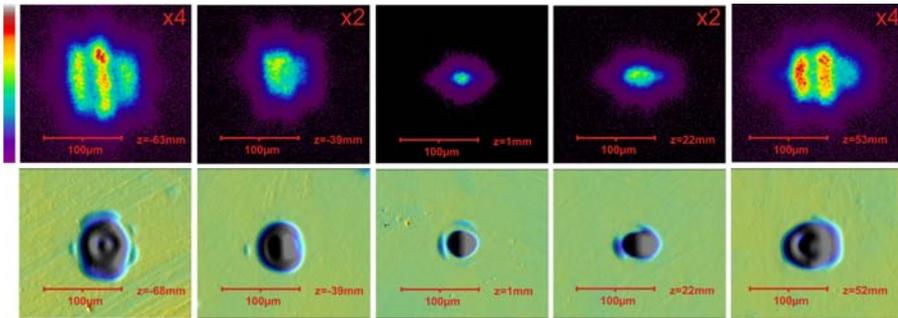


Abbildung 6.2: Strahlprofile (oben) und PMMA-Ablationsprofile (unten) für einzelne FLASH-Pulse an unterschiedlichen z -Positionen entlang der Strahlachse [15]. Zur besseren Darstellung wurde die Intensität der äußeren Strahlprofile 2-fach bzw. 4-fach angehoben.

2.2.3). Die Strahlparameter werden durch Ausgleichsrechnung (Origin) aus dem Propagationsgesetz

$$d^2(z) = a + bz + cz^2 \quad (6.1)$$

und den Gleichungen (2.37,2.38) bestimmt und lauten explizit

$$z_0 = -\frac{b}{2c} \quad (6.2)$$

$$d_0 = \frac{1}{2\sqrt{c}} \sqrt{4ac - b^2}$$

$$\theta = \sqrt{c}$$

$$z_R = \frac{1}{2c} \sqrt{4ac - b^2}$$

$$M^2 = \frac{\pi}{8\lambda} \sqrt{4ac - b^2} \quad (6.3)$$

[14]. In Abbildung 6.3a sind die Mittelwerte des Strahldurchmessers für die jeweilige z -Position zusammen mit der Fitfunktion aufgetragen. Die Strahlparameter sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Die angegebenen Fehlerintervalle wurden durch Fortpflanzung aus der Fehlerquadratsumme der Ausgleichsrechnung berechnet. Die Strahlparameter sind für eine effektive Wellenlänge von 10.8nm angegeben. Diese wurde durch Gewichten der spektralen Anteile der fundamentalen, der zweiten (0.35%) und der dritten (0.4%) Harmonischen des Strahls [120] mit dem Transmissionsfaktor der Niob-Folie ermittelt. Die zweite Harmonische hängt vom Betriebszustand des FEL ab ist und im Idealfall vollständig unterdrückt.

6.2.2 PMMA

Durch Bestrahlung mit einem einzelnen Puls wurden je sechs Ablationsprofile an neun unterschiedlichen z -Positionen mit variabler Schrittweite erstellt. Nach einem Ansatz

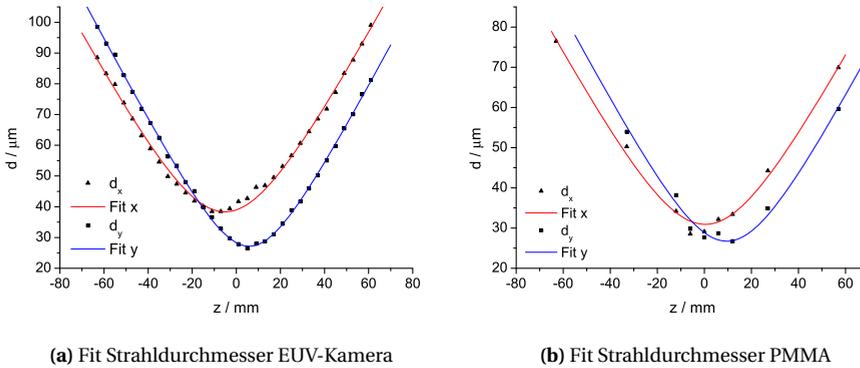


Abbildung 6.3: Strahldurchmesser d_x , d_y in Abhängigkeit der Position z entlang der Strahlachse z und die entsprechenden Fitfunktionen. Die Datenpunkte zeigen den Mittelwert über 100 (EUV-Kamera) bzw. sechs (PMMA) Profile. $z = 0$ entspricht der Mitte zwischen den Strahltaillen für x und y .

aus [152] wird aus der Tiefe, bis in die das Material ablatiert wird, ein Fluenzprofil rekonstruiert. Dabei wird ausgenutzt, dass die Ablation des Materials erst ab einem bestimmten Schwellwert der Fluenz einsetzt. Es wird angenommen, dass die Ablationstiefe gerade der Länge entspricht, bei der die einfallende Fluenz auf den Schwellwert abgefallen ist [153]. Für Absorption nach dem Lambert-Beerschen Gesetz und einen kollimierten Strahl folgt [152]

$$F(x, y) = F_{thr} \exp[d(x, y)/l_a] \quad (6.4)$$

wobei hier Ablationsschwelle $F_{thr} = 7.2 \text{ mJ/cm}^2$ und Abschwächungslänge $l_a = 55.2 \text{ nm}$ verwendet wurde [74]. Die Ablationsschwelle wurde aus $F_{thr}(\lambda_2) \cdot l_a(\lambda_2) = F_{thr}(\lambda_1) \cdot l_a(\lambda_1)$ mit $F_{thr} \sim 10 \text{ mJ/cm}^2$ [153] und $l_a = 76.57 \text{ nm}$ [74] bei $\lambda = 21.7 \text{ nm}$ berechnet. Bei Polymerablation mit Excimer-Lasern ist dieses Produkt in guter Näherung wellenlängenunabhängig [154]. Die bislang an FLASH gemessenen Ablationsschwellen bestätigen dieses Verhalten nicht eindeutig (2 mJ/cm^2 bei 32 nm [152], 10 mJ/cm^2 bei 21.7 nm [153], 30 mJ/cm^2 bei 13.5 nm [155]), jedoch ist die Wellenlängenabhängigkeit des Produkts gegenüber den Schwellwerten stark reduziert.

Die Höhenprofile der bestrahlten PMMA-Proben wurden mittels Rasterkraftmikroskopie („AFM“, Park Systems XE-150) und Weißlichtinterferometrie bei 50-facher Vergrößerung (Sensophar PL μ 2300) bestimmt. Wie in Abbildung 6.4 zu sehen besteht gute Übereinstimmung zwischen beiden Methoden. Der wesentliche Unterschied besteht in der geringeren lateralen Auflösung des Weißlichtinterferometers. Da die Mikrorauheit hier nicht von Interesse ist, wurden die Daten des Interferometers zur Rekonstruktion der Fluenzprofile herangezogen. In den Profilen (Abbildung 6.2, untere Reihe) erkennt man deutlich den durch das Schwellwertverhalten der Ablation hervorgerufenen scharfen Rand.

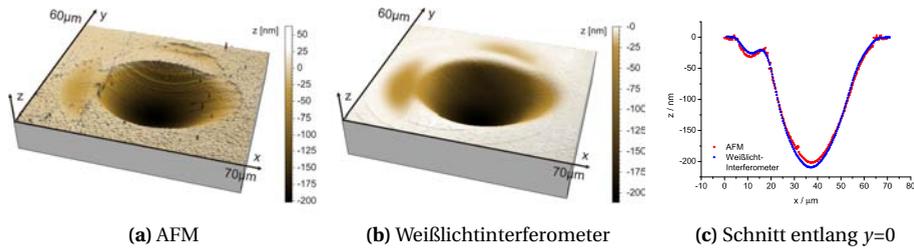


Abbildung 6.4: Höhenprofile einer PMMA-Probe nach Ablation durch einen Puls an FLASH BL2 ($\lambda = 25.9\text{nm}$, 7mm hinter der Strahltaile), bestimmt mittels AFM (a) und Weißlichtinterferometrie (b).

Aus den Fluenzprofilen wurden die zweiten Ortsmomente in x - und y -Richtung bestimmt und mit Gleichung (6.1) durch Ausgleichsrechnung die Strahlparameter berechnet. Die mittleren Strahldurchmesser jeder z -Position sowie die Fitfunktion sind in Abbildung 6.3b dargestellt. Die Strahlparameter sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst, wobei der angegebene Fehler die Fortpflanzung aus der Fehlerquadratsumme der Ausgleichsrechnung angibt.

6.2.3 Vergleich der Messverfahren

6.2.3.1 Hartmann-Sensor

Die Strahlparameter wurden durch Messung mit dem Hartmann-Sensor 1, wie in Abschnitt 5.3.2 beschrieben, bestimmt. Dabei wurde die Wellenfront auf einem kreisförmigen Auswertebereich mit 14 Subaperturen Breite unter Verwendung der ersten 16 Zerniketerme (Anhang A.2), d.h. bis zur sechsten Ordnung, berechnet. Nach den Ergebnissen in Tabelle 6.1 ist der Hartmann-Sensor zur Bestimmung der Parameter des FLASH-Strahls geeignet. Der Vergleich der Strahlparameter zeigt die spezifischen Vor- und Nachteile der drei Verfahren auf.

Es folgt die einfach-astigmatisch berechnete Beugungsmaßzahl $M_{ea}^2 = 4.1$ ($M_{ea}^2 = \sqrt{M_x^2 M_y^2}$) aus der Hartmann-Messung und $M_{ea}^2 = 3.9$ aus den Strahlprofilen der EUV-Kamera, sodass die Ergebnisse auf 5% übereinstimmen. Die relative Abweichung der Divergenz und der Tailenlage ist vergleichbar. Beide Parameter sind nicht sehr empfindlich gegenüber Rauschen auf den Schwerpunktspositionen des Hartmann-Sensors, da sie hauptsächlich durch den großen und ausgedehnten Defokus-Term der Wellenfront bestimmt sind. Der Strahldurchmesser wird (bis auf das hier nicht erreichte Beugungslimit) durch die höheren Wellenfrontterme bestimmt und offenbar eher überschätzt. Dies gilt insbesondere, weil der berechnete Strahldurchmesser durch Vernachlässigung der transversalen Kohärenz etwas zu klein sein sollte.

Die Bestimmung der Strahlparameter aus Strahlprofilen nach ISO 11146 beinhaltet die partielle Kohärenz auf natürliche Weise, da diese Einfluss auf den Strahldurchmesser hat. Es ist jedoch nicht möglich, die Strahlqualität separat nach Intensität, Wellenfront und Kohärenzgrad zu betrachten. Dies ist mit der im nächsten Abschnitt 6.3 beschriebenen Rekonstruktion der Wignerfunktion möglich. Der so bestimmte Kohärenzgrad

wird in Kapitel 5 verwendet um die Korrektur der Strahlparameter um Kohärenzeffekte abzuschätzen.

Bei der späteren Konstruktion des Sensors 2 und weiteren Messungen an BL2 (Kapitel 4 und 5) wurde das Signal-zu-Rausch-Verhältnis erhöht, indem der Abstand des Hartmann-Gitters zur CCD von 97mm auf 198,25mm verlängert wurde. Zudem wurde der Abstand der Subaperturen von $320\mu\text{m}$ auf $250\mu\text{m}$ verringert. Dadurch werden Intensität und Wellenfront zum einen dichter abgetastet, zum anderen stehen mehr Wellenfrontgradienten für die modale Rekonstruktion zur Verfügung.

Strahlparameter		Hartmann	EUV-Kamera	PMMA
z_R [mm]	x	34 ± 3	29 ± 2	28 ± 5
	y	30 ± 3	22 ± 2	24 ± 6
z_0 [mm]	x	2060 ± 8	1985 ± 1	1991 ± 2
	y	2068 ± 4	1996 ± 1	2000 ± 2
d_0 [μm] 2. Moment	x	53 ± 5	42 ± 2	31 ± 5
	y	45 ± 4	32 ± 2	27 ± 6
d_0 [μm] FWHM	x	31 ± 3	25 ± 1	18 ± 3
	y	27 ± 2	19 ± 1	16 ± 4
θ [mrad]	x	1.56 ± 0.06	1.47 ± 0.01	1.11 ± 0.01
	y	1.53 ± 0.04	1.47 ± 0.01	1.13 ± 0.01
M_i^2	x	4.7 ± 0.5	4.6 ± 0.3	1.04 ± 0.18
	y	3.9 ± 0.4	3.4 ± 0.2	0.92 ± 0.22

Tabelle 6.1: Strahlparameter Beamline BL2, bestimmt durch Hartmann-Messung ($\lambda = 13.8\text{nm}$) und zwei Messungen nach ISO 11146. Die Strahlprofile wurden durch PMMA-Ablation ($\lambda=25.9\text{nm}$) und eine EUV-Kamera ($\lambda=10.8\text{nm}$) bestimmt [15].

6.2.3.2 ISO 11146: Schwankungen des Strahls

Von den hier verglichenen Verfahren kann nur der Hartmann-Sensor Einzelpulse auflösen. Die Messungen nach ISO 11146 beruhen auf einer Vielzahl von Strahlprofilen einzelner Pulse, die Schwankungen unterworfen sind. Fluktuationen der Pulsenergie haben im Idealfall, bei vernachlässigbarem Offset der Kamera und linearem Detektor, keinen Einfluss auf die Berechnung des Strahldurchmessers. Dieser schwankt jedoch durch die statistischen Eigenschaften der FEL-Strahlung und über die Ausgleichsrechnung überträgt sich der Fehler auf die Strahlparameter. Mit der EUV-Kamera wurde die relative Schwankung $\pm 2.5\% - 5\%$ (Standardabweichung) bestimmt, abhängig von der Messebene.

Ein großer Vorteil der EUV-Kamera gegenüber der PMMA-Ablation ist die elektronische Auswertung, wodurch sich die Anzahl der Aufnahmen ohne großen experimentellen Aufwand erhöhen lässt. Durch ungenaues Anfahren der z -Positionen wird die

Messung ebenfalls verfälscht. Diese Fehler werden durch die Summe der Fehlerquadrate erfasst und sind wegen der großen Rayleighlänge nicht kritisch.

Eine Besonderheit der SASE Freie-Elektronen-Laser sind die longitudinalen Quellpunktschwankungen in der Größenordnung eines Meters, da die einzelnen Pulse nicht am gleichen Punkt im Undulator sättigen. Mit der Quelle schwankt auch ihr Bild, die Strahltaile hinter dem Ellipsoidspiegel, in der Größenordnung eines Millimeters. Zur Abschätzung des dadurch verursachten Fehlers sei die Schwankung von z_0 Gaußverteilt mit Varianz σ^2 um Mittelwert \bar{z}_0 . Der Erwartungswert E des quadrierten Strahldurchmessers ist

$$E(d^2) = d_0^2 \left(1 + \frac{\sigma^2}{z_R^2} + \frac{(z - \bar{z}_0)^2}{z_R^2} \right) \quad (6.5)$$

Eine Auswertung mit Ausgleichsrechnung und Gleichungen (6.2) liefert den korrekten Wert für die Divergenz und den Mittelwert der Strahltaile. Rayleighlänge, M^2 und Durchmesser der Strahltaile werden um den Faktor $\sqrt{1 + \sigma^2/z_R^2}$ überschätzt. Wegen der großen Rayleighlänge des Strahls fällt der Fehler nicht stark ins Gewicht (<2% relative Abweichung), ist jedoch nach Gleichung (6.5) nicht anhand des Bestimmtheitsmaßes der Ausgleichsrechnung zu erkennen. Die transversalen Schwankungen (Strahllagestabilität) verursachen keinen nennenswerten Fehler, da in die Auswertung nur Aufnahmen von Einzelpulsen eingehen.

6.2.3.3 P43 und PMMA im Vergleich

Nichtlinearität des Szintillators bewirkt, dass der Taillendurchmesser relativ zu den Strahldurchmessern bei größeren z überschätzt wird. Dadurch wird die Divergenz unterschätzt, die Rayleighlänge und M^2 überschätzt. Das hyperbolische Propagationsgesetz des Strahldurchmessers ist durch die Messwerte der EUV-Kamera gut erfüllt (Abbildung 6.3a) und der relative Fehler des M^2 -Wertes (5%) liegt nahe der Schwankungen des Strahldurchmessers.

In Abbildung 6.3 erkennt man, dass die hyperbolische Propagation des Strahldurchmessers aus den PMMA-Proben nicht mit vergleichbarer Genauigkeit reproduziert wird. Die relativen Fehler sind entsprechend größer, 15% für M^2 .

Ein Grund ist sicher die wesentlich kleinere Stichprobe, jedoch deutet der zu kleine und unphysikalische Wert für M^2 auf unterschätzte Strahldurchmesser bei großen z hin, vermutlich eine Folge des Schwellwertverhaltens. Zusätzlich kann der Ablationsprozess vom hier angenommenen Modell (Lambert-Beersches Gesetz und Schwellwertverhalten) abweichen. Größere Abweichungen wurden bislang jedoch erst ab ca. $300 \times F_{thr}$ beobachtet [155].

Ein großer Vorteil des Verfahrens ist, dass keine Abschwächung des Strahls erforderlich ist, die Auswirkungen auf die Wellenfront (siehe Abbildung 5.5) und das Frequenzspektrum haben kann. Daher ist das Verfahren eher geeignet um Fokussdurchmesser und -lage zu bestimmen, weniger zur vollständigen Charakterisierung der Propagationseigenschaften.

6.3 Rekonstruktion der Wignerfunktion aus Strahlprofilen

Die Wignerfunktion wird aus denselben, oben beschriebenen Strahlprofilen der EUV-Kamera rekonstruiert. Zur Rekonstruktion wurde ein am LLG entwickelter Programmcode eingesetzt, der im Folgenden beschrieben wird. Die Darstellung folgt der Veröffentlichung [36]. Wichtige Grundlagen zur Wignerfunktion sind in Abschnitt 1.3.2 zusammengefasst.

6.3.1 Numerische Rekonstruktion

6.3.1.1 Rekonstruktionsverfahren

Die Wignerfunktion h der wechselseitigen Intensität J ist durch die zweidimensionale Fouriertransformierte

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2s J\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{s}}{2}, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{u}\mathbf{s}) \quad (6.6)$$

gegeben [40]. $\mathbf{x} = (x, y)$ und $\mathbf{s} = (s_x, s_y)$ sind Koordinaten in einer Ebene senkrecht zur optischen Achse, $\mathbf{u} = (u, v)$ Winkelkoordinaten und $k = 2\pi/\lambda$ der Wellenvektor.

Die Propagation der Wignerfunktion von einer Eintrittsebene (i) durch ein ABCD-System (4x4 Systemmatrix \mathbf{M}) zu einer Austrittsebene (o) wird mit dem Phasenraumvektor $\mathbf{r} = (\mathbf{x}, \mathbf{u})$ beschrieben durch [37]

$$h_i(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}) = h_o(\mathbf{r}), \quad \mathbf{M}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & -\mathbf{B} \\ -\mathbf{C} & \mathbf{A} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Die inverse Systemmatrix \mathbf{M}^{-1} folgt aus der Symplektizitätsbedingung (2.28). Es folgt das Propagationsgesetz für die Fouriertransformierte \tilde{h} von h [156]

$$\tilde{h}_i(\mathbf{A}^T \mathbf{w} + \mathbf{C}^T \mathbf{t}, \mathbf{B}^T \mathbf{w} + \mathbf{D}^T \mathbf{t}) = \tilde{h}_o(\mathbf{w}, \mathbf{t}) \quad (6.8)$$

mit den Koordinaten des Fourierraums (\mathbf{w}, \mathbf{t}) . Nun seien $h_{\{p\}}$ die Wignerfunktion und $I_{\{p\}}$ die Intensität nach Propagation der Wignerfunktion h_{ref} von einer Referenzebene durch ein ABCD-System mit Systemmatrix $\mathbf{M}_{\{p\}}$. $\{p\}$ ist ein Parametersatz zur Beschreibung des Systems. Die Intensität kann als Marginalverteilung der Wignerfunktion ausgedrückt werden

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dudv h_{\{p\}}(x, y, u, v) = I_{\{p\}}(x, y) \quad (6.9)$$

Im Fourierraum lautet die Beziehung

$$\tilde{h}_{\{p\}}(w_x, w_y, 0, 0) = \tilde{I}_{\{p\}}(w_x, w_y) \quad (6.10)$$

und durch Kombination von (6.10) mit (6.8) folgt

$$\tilde{h}_{ref}\left(\mathbf{A}_{\{p\}}^T \mathbf{w}, \mathbf{B}_{\{p\}}^T \mathbf{w}\right) = \tilde{I}_{\{p\}}(\mathbf{w}) \quad (6.11)$$

d. h. die Fouriertransformierte der Projektion der propagierten Wignerfunktion auf die (x, y) -Ebene entspricht der Fouriertransformierten der Wignerfunktion an der Referenzposition in einer Schnittebene durch den Ursprung. Der Parametersatz $\{p\}$ bestimmt die Orientierung der Schnittebene im Phasenraum. Durch Wahl eines geeigneten Systems $\mathbf{M}_{\{p\}}$ und Parameterraums $\{p\}$ kann der gesamte Phasenraum abgetastet und die Wignerfunktion durch Fourier-Rücktransformation berechnet werden. Hier wird ein separierbarer Strahl angenommen, sodass die Wignerfunktion durch das Produkt

$$h(x, y, u, v) = h_x(x, u)h_y(y, v) \quad (6.12)$$

dargestellt werden kann. Diese Eigenschaft bleibt bei Propagation durch einfachastigmatische und orientierte ABCD-Systeme

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} A_x & 0 & B_x & 0 \\ 0 & A_y & 0 & B_y \\ C_x & 0 & D_x & 0 \\ 0 & C_y & 0 & D_y \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

erhalten und Gleichung (6.11) zerfällt in

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{ref,x}(A_{\{p\},x}w_x, B_{\{p\},x}w_x) &= \tilde{I}_{\{p\},x}(w_x) \\ \tilde{h}_{ref,y}(A_{\{p\},y}w_y, B_{\{p\},y}w_y) &= \tilde{I}_{\{p\},y}(w_y) \end{aligned} \quad (6.14)$$

für die x - und y -Richtung. In der hier beschriebenen Messung besteht das ABCD-System schlicht aus freier Propagation mit nur einem Parameter, der Position z , und den Matrixeinträgen $A_x=A_y=1$, $B_x=B_y=z$ (sonst null). Die Gleichungen (6.14) lauten dann

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{ref,x}(w_x, z w_x) &= \tilde{I}_{\{p\},x}(w_x) \\ \tilde{h}_{ref,y}(w_y, z w_y) &= \tilde{I}_{\{p\},y}(w_y) \end{aligned} \quad (6.15)$$

Der Vorteil des Separationsansatzes liegt hier in der Reduzierung der zu variierenden Parameter. Während der vierdimensionale Phasenraum aus Dimensionsgründen nicht vollständig durch die dreidimensionale Intensitätsmessung (Strahlprofil (x, y) an Position entlang der Strahlachse (z)) abgetastet wird, gilt dies nicht für die zweidimensionalen Unterräume.

6.3.1.2 Implementierung

In die Rekonstruktion der Wignerfunktion geht die Information des gesamten Strahlprofils ein, nicht nur der Durchmesser wie bei der Berechnung der Strahlparameter nach ISO 11146. Es werden daher nur N_z Strahlprofile, eines je z -Position, verwendet. Zunächst wird das Hauptachsensystem der Nahfeldverteilung (2.34) über alle z -Positionen berechnet und das Referenz-Koordinatensystem so gelegt, dass der Ausdruck

$$\sigma = N_z^{-1} \sum_i 2 |\langle xy \rangle_i| / (\langle x^2 \rangle_i + \langle y^2 \rangle_i) \quad (6.16)$$

minimiert wird [36]. Für jedes Strahlprofil werden die Marginalverteilungen I_x und I_y durch Summation über alle y - bzw. x -Werte der Intensität berechnet. Die Fouriertransformierten $\tilde{I}_{x,y}$ werden nach (6.14) auf je ein Gitter der Größe 256 x 256 abgebildet. Dabei wird jeder Messwert dem nächstgelegenen Gitterpunkt zugeordnet („Nearest Neighbour Interpolation“). Frei bleibende Gitterpunkte, die einer z -Position $z \in [0, 124\text{mm}]$ entsprechen, werden durch die Werte der benachbarten Messebenen j und $j+1$ mit $z \in (z_j, z_{j+1})$ gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{I}_i(w_i; z) = & \frac{z - z_j}{z_{j+1} - z_j} \tilde{I}_i \left(\sqrt{\frac{z_{Ri}^2 + (z - z_{0i})^2}{z_{Ri}^2 + (z_{j+1} - z_{0i})^2}} w_i; z_{j+1} \right) + \\ & \frac{z_{j+1} - z}{z_{j+1} - z_j} \tilde{I}_i \left(\sqrt{\frac{z_{Ri}^2 + (z - z_{0i})^2}{z_{Ri}^2 + (z_j - z_{0i})^2}} w_i; z_j \right) \end{aligned} \quad (6.17)$$

interpoliert mit der Lage der Strahlteile z_{0i} und $i = x, y$ [36]. Durch Rücktransformation wird die Wignerfunktion berechnet. Wechselseitige Intensität J_i , globaler Kohärenzgrad K_i sowie Entwicklungskoeffizienten $\{C_{nm}\}$ der Hermite-Gauß-Moden u_n (2.7) folgen aus den Beziehungen in den Veröffentlichungen [157, 158] und mit (1.28).

$$\nabla_{\perp} w(\mathbf{x}; z) = \frac{1}{I(\mathbf{x})} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 u \mathbf{u} h(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (6.18)$$

$$J(x, s_x) = \int_{-\infty}^{\infty} du h(x, u) e^{ikus_x} \quad (6.19)$$

$$K_x = \frac{\lambda}{P} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx du |h_x(x, u)|^2 \quad (6.20)$$

$$C_{nm,x} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx ds_x J_x(x, s_x) u_n \left(x + \frac{s_x}{2} \right) u_m^* \left(x - \frac{s_x}{2} \right) \quad (6.21)$$

Die y -Terme werden analog gebildet.

6.3.2 Ergebnisse der Rekonstruktion

Die Strahlprofile in Abbildung 6.2 deuten durch die Streifen darauf hin, dass der Separationsansatz eine gute Näherung darstellt. Dies wird unterstützt durch den kleinen verbleibenden Wert $\sigma = 0.043$ (6.16) für ein um 5° gedrehtes Koordinatensystem.

Die berechnete Wignerfunktion h_x in Abbildung 6.5a in der Ebene $z = (z_{0x} + z_{0y})/2$ weist zwei in der Winkelkoordinate separierte Anteile auf. An den in Abbildung 6.2 gezeigten Strahlprofilen der EUV-Kamera Nahe der Fokusposition ($z = -39\text{mm}, 1\text{mm}, 22\text{mm}$) ist dies noch nicht zu erkennen, doch die Profile bei größerem z ($-63\text{mm}, 53\text{mm}$) zeigen diese Modulation des Fernfelds entlang der x -Achse bereits [36]. Die

Grundform von h_y im Phasenraum erinnert an ein an der y -Achse gesichertes Rechteck. Das passt zum einen zu den Strahlprofilen, die auch bei größeren z -Werten vertikal keine vergleichbare Modulation aufweisen und bedeutet zum anderen, dass die Wellenfront konkav ist.

Strahlparameter	Sequenz 1	Sequenz 2	Sequenz 3
w_{rms} [nm]	0.43	0.47	0.83
K_x	0.29	0.29	0.3
K_y	0.36	0.36	0.38

Tabelle 6.2: Wellenfrontparameter w_{rms} und globaler Kohärenzgrad K_x, K_y aus drei Rekonstruktionen der Wignerfunktion. Jede Rekonstruktion basiert auf einer Sequenz von Strahlprofilen mit je einer Aufnahme an jeder der 32 z -Positionen [36].

Die wechselseitige Intensität wurde bis zur zehnten Ordnung in Hermite-Gauß-Moden (2.13) entwickelt. Es tragen einige, weitgehend unkorrelierte Moden zum Strahl bei. Demnach wird die Entwicklung von den diagonalen Entwicklungskoeffizienten dominiert, die in Abbildung 6.6 dargestellt sind. Es gilt $\sum_{n \neq k} |C_{n,k}|^2 / \sum_n |C_{nn}|^2 < 0.15$ für alle drei Sequenzen [36]. In horizontaler Richtung ist der Anteil der Grundmode am Strahl geringer und es tragen mehr Moden zum Strahl bei, wie schon das Strahlprofil wegen der ausgeprägten Strukturierung in horizontaler Richtung vermuten lässt.

Die nach Gleichung (6.18) aus der Wignerfunktion berechnete und über drei Sequenzen gemittelte Wellenfront ist in Abbildung 6.7 gezeigt. Sie ist wie die mit dem Hartmann-Sensor bestimmte Wellenfront von einem Astigmatismus a_{220} unter 0° dominiert, jedoch ist das Vorzeichen des Terms umgekehrt. Dies ist durch die unterschiedlichen Messebenen bedingt, der Nulldurchgang des Koeffizienten liegt nach der zweiten Strahltaile. w_{rms} schwankt über die Sequenzen von 0.43nm bis 0.83nm bzw. $\lambda/13 - \lambda/25$ bei $\lambda = 10.8\text{nm}$ (Tabelle 6.2). Die Wellenfront ist vergleichsweise gut korrigiert (vgl. Maréchal-Kriterium 2.3.2), wenn sie auch durch das Rekonstruktionsverfahren nicht derjenigen eines einzelnen Pulses entspricht. Die partielle Kohärenz hat demnach einen wesentlichen Anteil am $M_{ea}^2 = 4$ (EUV-Kamera) des Strahls an BL2.

6.3.3 Diskussion und Vergleich der Messwerte

In dieser ersten Messung der Wignerfunktion an einem FEL-Strahl im EUV-Spektralbereich konnte die Eignung des Verfahrens demonstriert werden. Das Hauptinteresse an der Rekonstruktion der Wignerfunktion liegt in dieser Arbeit an der Messung des Kohärenzgrades zur Abschätzung der Fehler durch die Vernachlässigung der partiellen Kohärenz bei der Bestimmung der Strahlparameter mit dem Hartmann-Sensor. Im Folgenden werden einige Möglichkeiten beschrieben, das Messverfahren selbst zu verbessern und potentielle Fehlerquellen aufgezeigt.

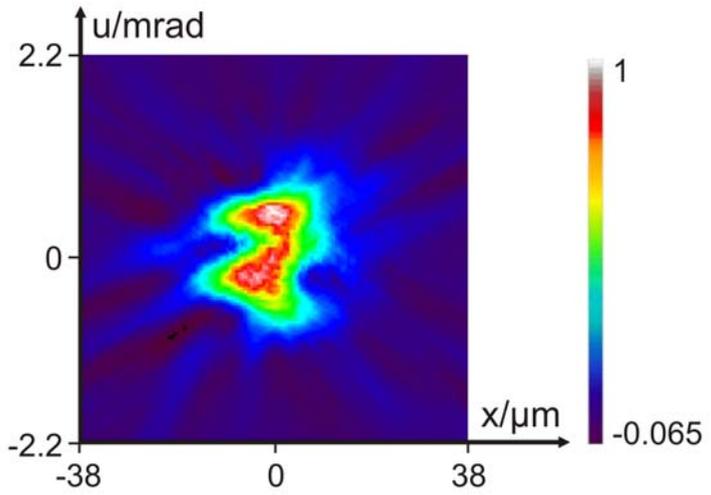
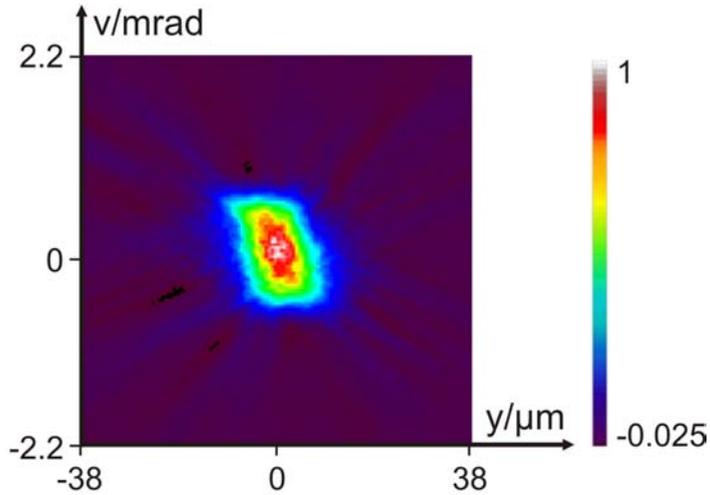
(a) $h_x(x, u)$ (b) $h_y(y, v)$

Abbildung 6.5: Wignerfunktionen h_x , h_y des Strahls an BL2 in der Mitte zwischen den Strahltaillen [36].

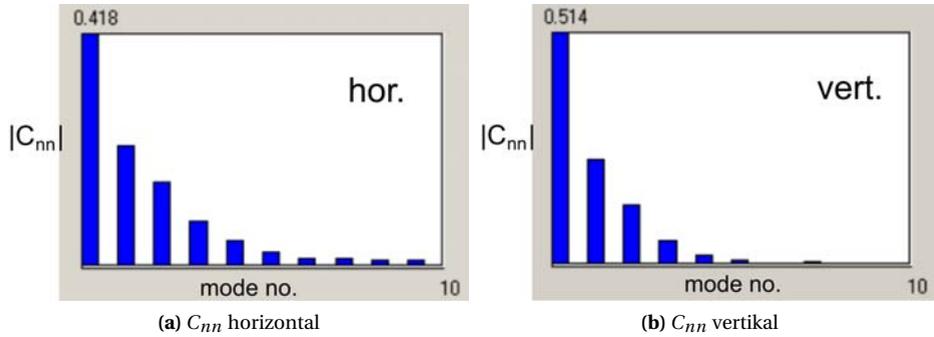


Abbildung 6.6: Entwicklung der Wignerfunktionen h_x , h_y nach Hermite-Gauß-Moden für x (horizontal) und y (vertikal). Gezeigt sind die diagonalen Entwicklungskoeffizienten C_{nn} [36].

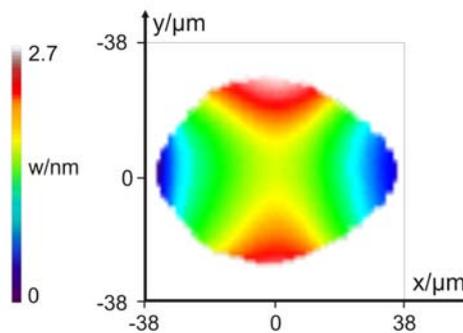


Abbildung 6.7: Die Wellenfront des Strahls mittig zwischen den Taillen in x - und y -Richtung an FLASH Beamline BL2, Mittel aus drei Sequenzen [36].

6.3.3.1 Fehlerquellen und Verbesserungsmöglichkeiten

- Da der Detektor durch die Strahltaile gefahren wird, ist eine starke Abschwächung des FLASH-Strahls unerlässlich um Beschädigungen und zu starke Nichtlinearität des Szintillators zu vermeiden. Durch sie wurde hier eine Mischung der zweiten und der dritten Harmonischen gemessen. Ihre Strahleigenschaften weichen etwas von der Fundamentalen ab [159] und die quasis-monochromatische Näherung ist schlechter erfüllt. Eine geeignete Metallfilter- und Gasabschwächer-Kombination kann die Beeinflussung des Spektrums minimieren.
- Der Separationsansatz hat sich als nützliche Näherung erwiesen. Mit etwas höherem experimentellem Aufwand kann jedoch auch die volle vierdimensionale Wignerfunktion rekonstruiert werden (siehe z.B. [38]).
- Wegen des endlichen z -Bereichs wird etwa 20% des $w_x t_x$ - und $w_y t_y$ -Phasenraums nicht durch Messwerte abgedeckt. Dieser Bereich wurde hier interpoliert, kann jedoch auch durch Messung hinter einem zusätzlichen Fokussierspiegel geschlossen werden.
- Der Phasenraum wird mit Daten aus Strahlprofilen gefüllt, die aus mehreren Messebenen und Pulsen stammen. Die Fluktuationen des FLASH-Strahls übertragen sich dabei. Die drei ausgewerteten Sequenzen verdeutlichen die Schwankungen, erfassen aber nicht alle (systematischen) Unsicherheiten, die daraus entstehen.

6.3.3.2 Vergleich mit anderen Kohärenzmessungen an FLASH

Es wurden bislang drei Messungen der transversalen Kohärenz des FLASH-Strahls mit drei unterschiedlichen Messverfahren publiziert: Rekonstruktion der Wignerfunktion [36], Youngscher Doppelspalt [55] und Autokorrelation [159].

Aus der Rekonstruktion der Wignerfunktion (Pulsenergie $E = 25\mu\text{J}$, $\lambda = 25.9\text{nm}$, Abstand zur Quelle $z = 75\text{m}$) folgt der globale Kohärenzgrad $K_x = 0.29$ und $K_y = 0.37$ ($K = 0.11$). Dies entspricht näherungsweise den q -Parametern $q_x = 0.61$ und $q_y = 0.79$, $q_i = \sigma_{gi}/\sigma_{si}$, $i = x, y$ (siehe Abschnitt 2.1.3). Durch Autokorrelation wurde $q_i = 1.2$ gemessen ($3\mu\text{J}$, 24nm , $z = 90\text{m}$) [159]. Zuvor wurde im Youngschen Doppelspaltversuch $q_x = 0.4$ und $q_y = 0.36$ gemessen ($3\mu\text{J}$, 13.7nm , $z = 20\text{m}$) [55].

Die publizierten Ergebnisse der transversalen Kohärenz des FLASH-Strahls streuen über einen recht breiten Bereich. Das kann an den Umbauten der Einrichtung liegen, an der Strahlungserzeugung (z. B. Sättigungsgrad [123]) und an den experimentellen Bedingungen (z. B. Wahl der Aperturen, Abschwächung).

In dieser Arbeit wird für weitergehende Abschätzungen der aus der Wignerfunktion bestimmte globale Kohärenzgrad verwendet. Zwei Vorteile sind zum einen die zeitliche Nähe zu den Hartmann-Messungen und zum anderen, dass die Messung direkt am Experimentierplatz von BL2 vorgenommen wurde.

7 Strahlcharakterisierung an LCLS

Als der Teil der Aktivitäten zur Inbetriebnahme der Linac Coherent Light Source (LCLS) wurde der Hartmann-Sensor September 2009 zur Strahlcharakterisierung an der Experimentierstation für Atom-, Molekül- und optische Physik („AMO End-Station“) [160] eingesetzt [161].

7.1 Experimenteller Aufbau

Der experimentelle Aufbau in Abbildung 7.1 zeigt links den für die Inbetriebnahme installierten „Gas Monitor Detector“ (GMD) des Deutschen Elektronen-Synchrotrons und rechts den ersten der beiden hier beschriebenen Hartmann-Sensoren (Kapitel 4, Hartmann-Platte: Ta $7\mu m$, $p = 320\mu m$, $\varnothing = 65\mu m$). Strahlaufwärts (nicht im Bild) schließt sich zuerst die permanent installierte Diagnoseeinheit der AMO End-Station und dann die Probenkammer an. Der Hartmann-Sensor ist auf einer Linearverföhrung und einem Goniometer befestigt, die zur Justage von Position und Winkel dienen.

Der Strahl wird über drei Planspiegel (Abstand 92.66m, 95.32m und 104.23m vom Undulator) zur AMO End-Station geföhrt, die ca. 120m vom Undulator entfernt liegt [77]. Alle Spiegel bestehen aus Borcarbid- (B_4C) beschichtetem Silizium-Substrat und stehen unter streifendem Einfall ($13.85mrad$ [77]) im Stahl, sodass spontane Undulatorstrahlung und Harmonische über 2keV abgeschnitten werden. An der AMO End-Station wird der Strahl durch eine Kirkpatrick-Baez (KB) Optik [80] mit Brennweiten $f_x = 1.6m$ und $f_y = 1.1m$ fokussiert (Design-Wert Fokusedurchmesser ca. $1\mu m$ FWHM), sodass Intensitäten über $10^{18}W/cm^2$ erreicht werden. 3365mm hinter der Brennebene wurde der Sensor montiert.

Die Messungen wurden mit Einzelpulsen (10Hz) à ca. 1.5mJ bei einer Wellenlänge von $\lambda = 1.5nm$ (Photonenergie $E_{ph} = 830eV$) durchgeföhrt. Die Werte sind aus den Elektronenstrahlparametern berechnet, da die Photodiagnostik zu diesem Zeitpunkt noch nicht vollständig in Betrieb genommen war. Zur Abschwöchung um fast vier Größensordnungen wurde der permanent in der Beamline installierte Gasabschwöcher, ein 4.5m langes Rohr mit differentieller Pumpstufe, mit 2.6mbar Stickstoff befüllt [162]. Die ebenfalls permanent in die Beamline integrierten Beryllium (Be)-Filter wurden nicht verwendet, da sie zu starker Lichtgranulation („Speckle“) föhren.

7.2 Intensitätsprofil und Stabilität des Strahls

Das Signal des Hartmann-Sensors in Abbildung 7.2 (links) besteht aus scharfen und sehr gut getrennten Profilen der Teilstrahlen, da die Beugung bei der Wellenlänge $\lambda = 1.5nm$ geringer ist als im von FLASH abgedeckten Spektralbereich, für den der Sensor optimiert wurde. Das Strahlprofil zeigt eine rechteckige Form, weil die Apertur der KB-Optik nicht den gesamten Strahl aufnehmen kann.

Auffällig sind die in der rechts daneben abgebildeten bikubischen Interpolation gut sichtbaren vertikalen Streifen. Sie sind von Puls zu Puls stabil und sind ein Interferenzeffekt, der durch die Kombination von hohem Kohärenzgrad und kurzer Wellenlänge des FEL-Strahls durch Formfehler der Spiegel hervorgerufen wird (Abschnitt 3.1).

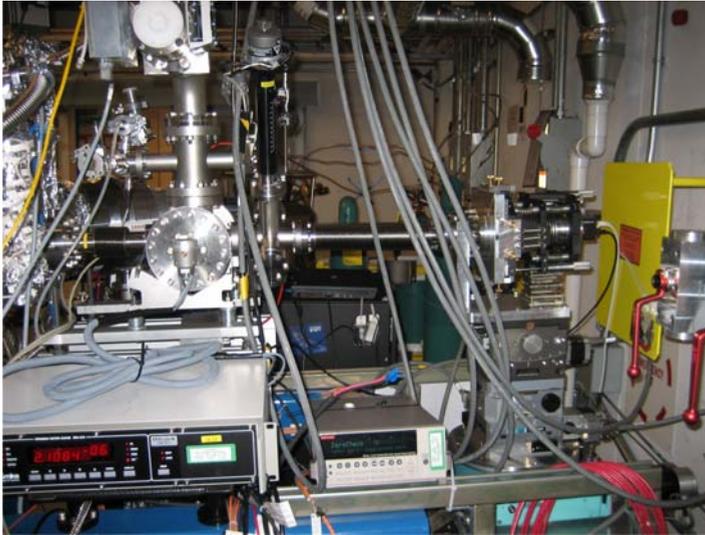


Abbildung 7.1: Experimenteller Aufbau zur Strahlcharakterisierung an der AMO End-Station an LCLS. Links im Bild ist der „Gas Monitor Detector“ (GMD) des DESY und rechts der Hartmann-Sensor des LLG.

Nach einer Messung [77] an einem der Planspiegel liegen diese bei 0.79nm (Standardabweichung σ) im hochfrequenten Bereich ($0.5/\mu\text{m} - 50/\mu\text{m}$) und 0.35nm im mittleren ($10^{-3}/\mu\text{m} - 0.5/\mu\text{m}$). Der Formfehler (niederfrequenter Bereich, $1/\text{Apertur} - 10^{-3}/\mu\text{m}$) ist $<2\text{nm}$ für alle Planspiegel. Durch Projektion aus der Spiegeloberfläche in eine Ebene senkrecht zur optischen Achse (nach Reflexion) werden die Frequenzen in der Einfallsebene zu größeren Werten hin verschoben, sodass niedrigere und mittlere Frequenzen die Streifen erzeugen [77]. Die vertikale Ausrichtung der Streifen zeigt die vertikale Einbaulage der Planspiegel an.

Die Messungen zeigen, dass die Pulsenergie über die Aufnahmen um 19% schwankt (Standardabweichung σ über 30 Aufnahmen), etwa doppelt soviel wie in [141] berichtet. Der Strahl hatte einen Durchmesser an der Sensorposition von $3.53 \pm 0.05\text{mm} \times 5.28 \pm 0.1\text{mm}$ und zeigte mit Schwankungen von $\pm 23\mu\text{m}$ in horizontaler und $\pm 53\mu\text{m}$ in vertikaler Richtung (σ entspricht 0.3% bzw. 0.5% des Strahlradius) eine gute Lagestabilität.

7.3 Bestimmung der Wellenfront

Die Wellenfront ist in Abbildung 7.3 links inklusive Defokus abgebildet, rechts daneben die Aberrationen der Wellenfront. Die Aberrationen werden von einem Astigmatismus bei 0° dominiert. Bezogen auf 30 Einzelpulse ist $w_{pv} = 4.8 \pm 1.4\text{nm}$ und $w_{rms} = 0.9 \pm 0.2\text{nm}$. Die Beugungsmaßzahl ist $M^2 = 6.7 \pm 2.6$ und die Strahltaille in x -Richtung liegt 3365mm vor der Sensorposition und besitzt den Durchmesser $7.3\mu\text{m}$.

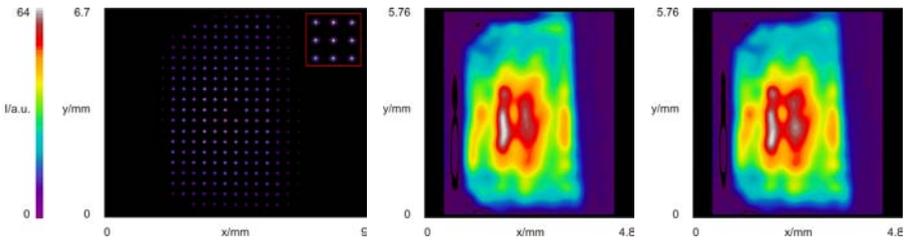


Abbildung 7.2: Intensitätsprofil Hartmann-Sensor für Einzelpulse

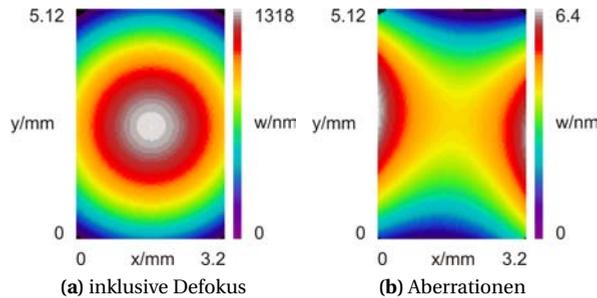


Abbildung 7.3: Wellenfront an der LCLS AMO End-Station. Es wurden ein Raster von 11×17 Stützstellen und neun Zernikepolynome verwendet.

In y -Richtung wurde 3343mm und $9\mu\text{m}$ bestimmt. Horizontal entspricht die Fokusslage der erwarteten Position, jedoch bei einer astigmatischen Differenz von 22mm .

Um den Einfluss fehlerhafter Pixelwerte zu verringern wurde außerdem über die 30 Aufnahmen gemittelt. Dann folgen $w_{pv} = 4.7\text{nm}$ und $w_{rms} = 0.9\text{nm}$ sowie $M^2 = 3.5$ und $d_{0x} = 5.9\mu\text{m}$, $d_{0y} = 5.9\mu\text{m}$. Die Lage der Strahltaile bleibt unverändert. Die so berechnete Strahlqualität ist besser, der Durchmesser an der Strahltaile entsprechend kleiner. Physikalisch sind die Auswertungen jedoch nicht äquivalent, da im ersten Fall die mittlere Qualität eines einzelnen Pulses, im zweiten Fall die Qualität des mittleren Pulses berechnet wird.

Wellenfront und die Strahlparameter wurden wie in den Kapiteln 4 und 5 beschrieben berechnet. Es wurden nur die ersten neun Zernikepolynome (Anhang A.2) verwendet, weil höhere Ordnungen mit ihren typischerweise kleineren Beiträgen zur Wellenfront stärker vom Rauschen betroffen sind. Die großen Beiträge höherer Ordnung sind hier ein Hinweis auf verrauschte Schwerpunktspositionen. Alternativ bieten sich bei diesem Strahl wegen der rechteckigen Form auch Legendrepolynome an, da sie orthogonal auf dem Rechteck sind. Wegen der KB-Optik ist jedoch zu erwarten, dass Defokus und Astigmatismus dominieren, die gut in Zernikepolynomen dargestellt werden. Zur Wellenfrontrekonstruktion wurde eine Referenz verwendet, die ein halbes Jahr zuvor am FLASH mittels einer $5\mu\text{m}$ Lochblende in 3870mm Abstand zum Sensor bei $\lambda = 13.5\text{nm}$ erzeugt wurde (Abschnitt 5.1.2).

Die transversale Kohärenz beeinflusst die Bestimmung der Strahlparameter an LCLS in geringerem Maße als an FLASH. Der globale Kohärenzgrad wird in [56] mit $K_i = 0.75 \pm 0.08$ ($i = x, y$) höher angegeben als die an FLASH bestimmten Vergleichswerte ($K_x = 0.29$ und $K_y = 0.37$, Kapitel 6). Daraus folgt, wenn die gleiche Abschätzung mithilfe des Gauß-Schell-Modells wie in Abschnitt 5.1.6 getroffen wird, eine Korrektur des M^2 -Wertes um lediglich 0.8%.

7.4 Detektor und Kalibrierung

Den an FLASH gesammelten Erfahrungen zufolge ist es nicht zwingend notwendig, aber vorteilhaft, den Sensor bei der Wellenlänge zu kalibrieren, bei der später gemessen wird. Es ist zudem möglich, dass die mechanische Beanspruchung durch den Transport eine neue Kalibrierung notwendig macht. An der AMO End-Station war eine Kalibrierung mit einer wenige Mikrometer großen Lochblende nicht möglich, weil die benötigte Propagationsstrecke hinter der Blende bei $\lambda = 1.5\text{nm}$ in der Experimentierhütte nicht realisiert werden konnte. Versuche mit einer Lochblende mit $\varnothing 100\text{nm}$ (Rückseite $\varnothing 200\text{nm}$) in $1.2\mu\text{m}$ Goldfolie (hergestellt mit fokussierten Ionenstrahlen, „FIB“) zeigten zu hohe Transmission der Folie.

Während der fünftägigen Messungen haben sich über die Zeit Strahlenschäden auf dem Detektor gebildet, die zu überhöhten Pixelzählwerten führten. Für die Auswertung wurde ein zusätzlicher Schwellwert von 100 Zählwerten (2.4% der Dynamik) angesetzt, wodurch die meisten Fehlpixel nicht eingehen, und es wurden nur Aufnahmen der ersten Schicht in die Auswertung einbezogen. Um diesen Fehler in Zukunft zu reduzieren, kann anstelle eines beschichteten Chips eine EUV-Kamera im Stile des in Kapitel 6 beschriebenen Systems verwendet werden.

8 Untersuchung photothermischer Verformungen bei 15keV

In den ersten Kapiteln dieser Arbeit wurde die Wellenfront von Freie-Elektronen-Lasern gemessen und genutzt um Fokussierspiegel mehrerer Beamlines zu justieren. Durch den FEL-Strahl hervorgerufene thermische Verformungen können unabhängig von der statischen Formtreue und der Justage der Optik Wellenfrontaberrationen erzeugen. Es wurde ein Wellenfront-basiertes Verfahren zur zeitaufgelösten Messung dieser Verformungen entwickelt und an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) demonstriert [163].

8.1 Hintergrund: Thermische Verformung von Röntgenoptiken

Die Messung der thermischen Verformungen ist vor allem durch den geplanten Freie-Elektronen-Laser *European XFEL* (XFEL) motiviert, der die Photonenergie 0.4-12.4keV abdecken und dabei eine maximale Brillanz von 5×10^{33} ¹ erreichen wird [164]. Die mittlere Leistung wird mit bis zu 490W [165] deutlich größer sein als die an FLASH erreichten 100mW [135] und dadurch die Optiken stärker belasten.

Der Erhalt der Strahleigenschaften erfordert eine Standardabweichung der Spiegelform von unter 2nm über eine 800mm lange Apertur [164]. Statische Messungen mittels Deflektometrie haben die erforderliche Messgenauigkeit über diese Länge bereits erreicht [166].

Zusätzliche Formfehler durch Halterung des Spiegels und lokale Erwärmung des Materials erfordern in-situ-Messverfahren. Diese wurden bereits entwickelt, um die thermische Verformung von Kristall-Monochromatoren und Spiegeln an Synchrotronstrahlquellen zu messen. Sie basieren auf Hartmann-Shack-Sensoren [167, 168] oder einer interferometrischen Technik, dem Pentaprisma-Long Trace Profiler [169]. Es wurde jeweils eine Messgenauigkeit von unter einem Mikrometer erreicht, jedoch sind bislang nur statische Verformungen betrachtet worden. Da Relativmessungen gefordert sind, erscheinen Hartmann-Shack-Sensoren besonders geeignet.

Verglichen mit Synchrotronquellen erreichen Freie-Elektronen-Laser höhere Energien in einzelnen Pulsen, sodass auch die zeitaufgelöste Kinetik der Deformation relevant ist. Zur theoretischen Beschreibung der Kinetik wurden bereits Modelle entwickelt [170, 171].

Das hier beschriebene Experiment ist nach einem Pump-Probe-Ansatz aufgebaut, wobei Synchrotron-Pulszüge die Deformation in einer Silizium-Probe pumpen. Ein dazu synchronisierter Femtosekundenlaser wird von der Probe reflektiert und auf einen Hartmann-Shack-Sensor gelenkt. Im Gegensatz zu früheren Anwendungen von Hartmann-Sensoren zur Prüfung optischer Flächen [172, 173] wird auf optische Elemente zwischen der Probe und dem Sensor verzichtet und das Oberflächenprofil durch Rückpropagation der Wellenfront berechnet.

¹in Photonen/(s mm^2mrad^2) in 0.1% spektraler Bandbreite

8.2 Experimenteller Aufbau und Durchführung

8.2.1 Experimenteller Aufbau

Das Experiment wurde Mai 2010 an der ESRF-Beamline ID09 im quasi-monochromatischen Strahl („Pink Beam“) bei 15keV Photonenergie durchgeführt [17]. Es wurde der Vier-Bunch-Betriebsmodus des Synchrotrons gewählt, der den größten Photonenfluss erzeugt. Die Pulsenergie $2.7\mu\text{J}$ wurde mit einer Photodiode gemessen. $82\mu\text{s}$ lange Pulszüge in zeitlichem Abstand von 1ms und mit je 120 Röntgenpulsen (Pulsdauer 100ps) wurden mit einem Shutter ausgewählt und zur Maximierung des Photonflusses senkrecht auf die Probe fokussiert. Mit dem Schneidekanten-Verfahren wurde die Fokusgröße $125\mu\text{m} \times 64\mu\text{m}$ FWHM bestimmt. Außerdem wurde festgestellt, dass das Intensitätsprofil in der Brennebene recht gut durch eine Gaußfunktion beschrieben wird.

Ein synchronisierter Femtosekundenlaser (Ti:Saph, $\lambda = 780\text{nm}$ (nahes Infrarot, „NIR“), Pulsdauer 100fs, Pulsenergie 2mJ, Repetitionsrate 1kHz) mit einstellbarem Delay t zum Röntgen-Pulszug wurde 4mm vor der Probe mit einer Linse ($f = 25\text{cm}$) fokussiert, dann von der Probe unter einem Einfallswinkel von 41° reflektiert und schließlich auf einen in 41cm Entfernung montierten Hartmann-Shack-Sensor gelenkt (Abbildung 8.1). Die Zeitstruktur des Experiments ist in Abbildung 8.3 schematisch dargestellt. Die Pulsenergie wurde vor der Probe auf etwa 5nJ abgeschwächt. Um thermische Linsen oder gar irreversible Schäden in starken Neutraldichtefiltern (ND-Filter) zu vermeiden, wurde eine Anordnung aus Reflexion unter Brewster-Winkel, Pol- und ND-Filter verwendet. Die Wellenfront des NIR-Lasers wurde durch Raumfilterung mit einer Lochblende unter Vakuum verbessert. Der gesamte Messaufbau wurde abgedeckt um Wellenfrontaberrationen durch Luftbewegungen zu reduzieren.

Als typisches Substratmaterial für Röntgenspiegel wurde eine Siliziumprobe (Durchmesser 25mm, Dicke 7mm, monokristallin, Oberfläche (111) Richtung) mit hoher Oberflächenqualität ($\lambda/10$ bei 633nm, RMS-Rauigkeit 1\AA) gewählt. Die Probe wurde mit einer 100nm dicken Platin-Beschichtung versehen, die etwa 3% der einfallenden Energie der Röntgenpulse absorbiert und den NIR-Testlaser sehr gut reflektiert.

Der Hartmann-Shack-Sensor besteht aus einer CCD-Kamera (12 Bit, 1280×1024 Pixel, $6.45\mu\text{m}$ Pixelbreite), dessen Chip in der Brennebene eines Rasters aus plankonvexen Quarz-Mikrolinsen ($f = 40\text{mm}$, Abstand der Mikrolinsen 0.3mm) angebracht ist. Der Sensor wurde zuvor am Laser-Laboratorium Göttingen für die Messung thermischer Linsen in refraktiven Optiken mit relativer Messgenauigkeit unter einem Nanometer entwickelt [174]. Durch die Verwendung eines divergenten Teststrahls ist es in diesem Experiment möglich, eine Wellenfrontdeformation zu messen, die lateral kleiner ist als der Abstand der Mikrolinsen untereinander.

8.2.2 Durchführung

Pump- und Teststrahl konnten auf der Probe durch die diffus gestreute NIR-Strahlung bzw. die angeregte Lumineszenz der Platin-Schicht unter dem in Aufnahme 8.2 gezeigten Mikroskop betrachtet werden. Durch Justage der Ablenkspiegel wurde das $500\mu\text{m}$ breite Strahlprofil des Teststrahl so auf der Probe positioniert, dass der Fokus des Rönt-

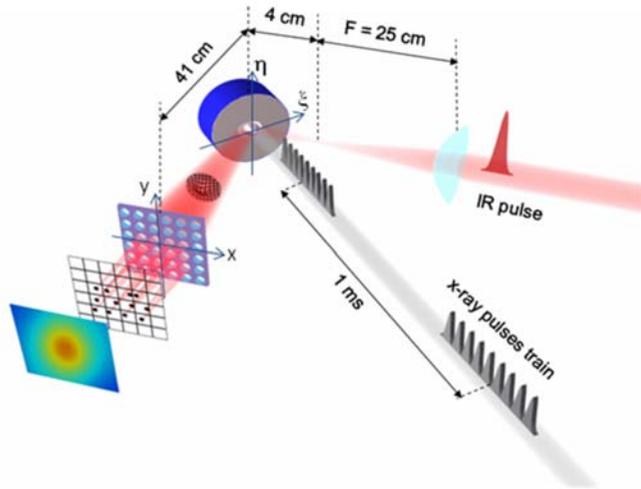


Abbildung 8.1: Schematische Zeichnung des experimentellen Aufbaus. Röntgenpulszüge erzeugen eine Verformung in einer Silizium-Probe und deformieren so die Wellenfront eines reflektierten Testlaserpulses, die mithilfe eines Hartmann-Shack-Sensors gemessen wird (Grafik aus [17]).

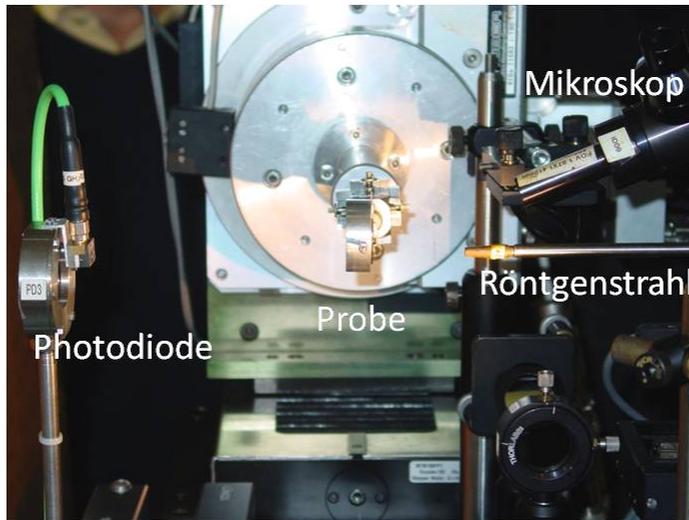


Abbildung 8.2: Ansicht der Probenhalterung und des Aufbaus zur Ausrichtung der Probe im Röntgenstrahl.

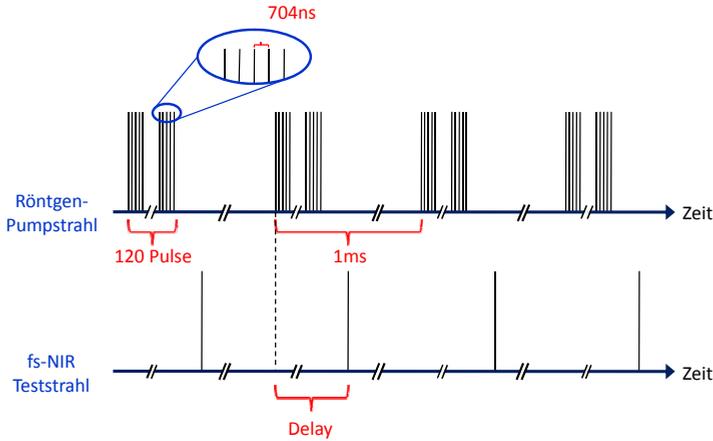


Abbildung 8.3: Zeitstruktur des Pump-Probe Experiments zur Untersuchung von thermischen Verformungen in einem Silizium-Substrat.

genstrahls darin zentriert war. Danach wurde der Hartmann-Sensor so montiert, dass das gesamte Gesichtsfeld ausgenutzt wurde. Der zeitliche Abstand zwischen dem Beginn eines Pulszuges und dem Testlaser-Puls (Delay t) wurde elektronisch durch Ändern der Phase des modengekoppelten Laser-Oszillators variiert. Für jedes Delay wurden zunächst Referenzaufnahmen des Teststrahls mit dem Hartmann-Sensor ohne Bestrahlung der Probe durch Röntgenpulse gemacht. Danach wurde die Probe mit Pulszügen in Abstand von 1ms aufgeheizt und der Teststrahl ebenfalls aufgezeichnet. Für jede berechnete Wellenfront wurden 64 Aufnahmen à 25ms Belichtungszeit gemittelt, sodass 1600 Pulse in die Rekonstruktion eingehen. Zuletzt wurden erneut Aufnahmen ohne Bestrahlung der Probe gemacht um den Fehler der Wellenfrontbestimmung abzuschätzen. Danach wurde das Delay verändert und die gesamte Prozedur wiederholt.

8.3 Messung der Oberflächendeformation

8.3.1 Rekonstruktion der Oberfläche aus der Wellenfront

Die Berechnung der Wellenfront aus der Lage der Foki der Mikrolinsen erfolgt ganz analog zum Hartmann-Sensor und ist in Kapitel 4 beschrieben. Vor den oben beschriebenen Messungen wurde der Sensor mit einem 50-fach aufgeweiteten Helium-Neon-Laser kalibriert. Der Teststrahl an ID09 wurde durch 21x19 Mikrolinsen gerastert und es wurde eine modale Wellenfrontrekonstruktion mit Zernikepolynomen bis zur sechsten Potenz in der radialen Koordinate verwendet.

Im Folgenden wird die Berechnung der Probenoberfläche aus der Wellenfront beschrieben [17]. Das Koordinatensystem Σ der Probe bestehe aus den Koordinaten (ξ, η, ζ) und $\zeta = 0$ sei die Probenoberfläche. Die (ξ, ζ) -Ebene sei die Einfallsebene und α der Einfallswinkel zum Lot des Teststrahls. Durch Rotation um die η -Achse um den Winkel $-\alpha$, gefolgt von einer Translation um L entlang der gedrehten Achse ζ folgt das

Sensor-Koordinatensystem S mit den Koordinaten (x, y, z) . Der Detektor liegt in der Ebene $z = 0$.

Es wird angenommen, dass die komplexe Amplitude des Teststrahls nach Reflexion an der Probenoberfläche durch die Form

$$U(\xi, \eta, 0) = U_i(\xi, \eta, 0) T(\xi, \eta) \quad (8.1)$$

dargestellt wird, wobei $U_i(\xi, \eta, 0)$ die komplexe Amplitude des einfallenden Teststrahls ist und der Phasenfaktor $T(\xi, \eta)$ die Reflexion an der Probe beschreibt. Wegen der geringen Höhe der Oberflächendeformation gegenüber der Wellenlänge und weil die Divergenz des Teststrahls nicht zu groß ist, wird die einfache Form

$$T(\xi, \eta) = \exp\left[-2ik \cos(\alpha) \delta h(\xi, \eta)\right] \quad (8.2)$$

für den Phasenfaktor angenommen. Dabei ist $\delta h(\xi, \eta)$ die die Höhe der Deformation für einen bestimmten Punkt (ξ, η) und k der Wellenvektor. Die komplexe Amplitude in der Detektorebene ist nach dem Huygens-Fresnel-Prinzip bei Vernachlässigung des Neigungsfaktors [20]

$$U(x, y, 0) = -\frac{i}{\lambda} \iint d\xi d\eta U(\xi, \eta, 0) \frac{\exp(ikR)}{R} \quad (8.3)$$

wobei R der Abstand von einem Punkt $\xi_0 = (\xi_0, \eta_0, 0)$ auf der Spiegeloberfläche zu einem Punkt $x_0 = (x_0, y_0, 0)$ in der Detektorebene ist und durch

$$R^2 = (x_0 - \xi_0 \cos \alpha)^2 + (y_0 - \eta_0)^2 + (L + \xi_0 \sin \alpha)^2 \quad (8.4)$$

gegeben ist. Mit der Distanz von der Probe zum Sensor $L = 410\text{mm}$, dem Radius des Teststrahls in der Probenebene $a = 250\mu\text{m}$ und der Wellenlänge $\lambda = 0.78\mu\text{m}$ folgt die Fresnelzahl $a^2/(L\lambda) = 0.2$. Es ist demnach gerechtfertigt, R im Exponenten in zweiter Ordnung in ξ/z , η/z , x/z und y/z zu entwickeln und im Nenner $L \approx R$ zu nähern. Die Propagation wird durch den Operator \mathbf{F} vermittelt und die Rückpropagation in die Probenebene durch

$$\begin{aligned} \hat{U}(\xi, \eta, 0) &= \mathbf{F}^{-1}\left[U(x, y, 0)\right] \\ &= \frac{i \cos \alpha}{\lambda L} e^{-ikL} \exp\left[-\frac{ik}{2L}(\xi^2 \cos^2 \alpha + \eta^2)\right] \times \\ &\quad \iint dx dy U(x, y, 0) \exp\left[-\frac{ik}{2L}(x^2 + y^2)\right] \exp\left[\frac{ik}{L}(x\xi \cos \alpha + y\eta)\right] \end{aligned} \quad (8.5)$$

mit dem inversen Operator \mathbf{F}^{-1} und der komplexen Amplitude abzüglich Tilt-Terme \hat{U} . Dort, wo die Amplituden $\mathbf{F}^{-1}(U_{def.})$ (verformte Probe) und $\mathbf{F}^{-1}(U_{nicht-def.})$ (ohne Verformung) verschieden von null sind, berechnet sich der Phasenfaktor der Reflexion aus dem Verhältnis

$$T(\xi, \eta) = \frac{\mathbf{F}^{-1}(U_{def.})}{\mathbf{F}^{-1}(U_{nicht-def.})} \quad (8.6)$$

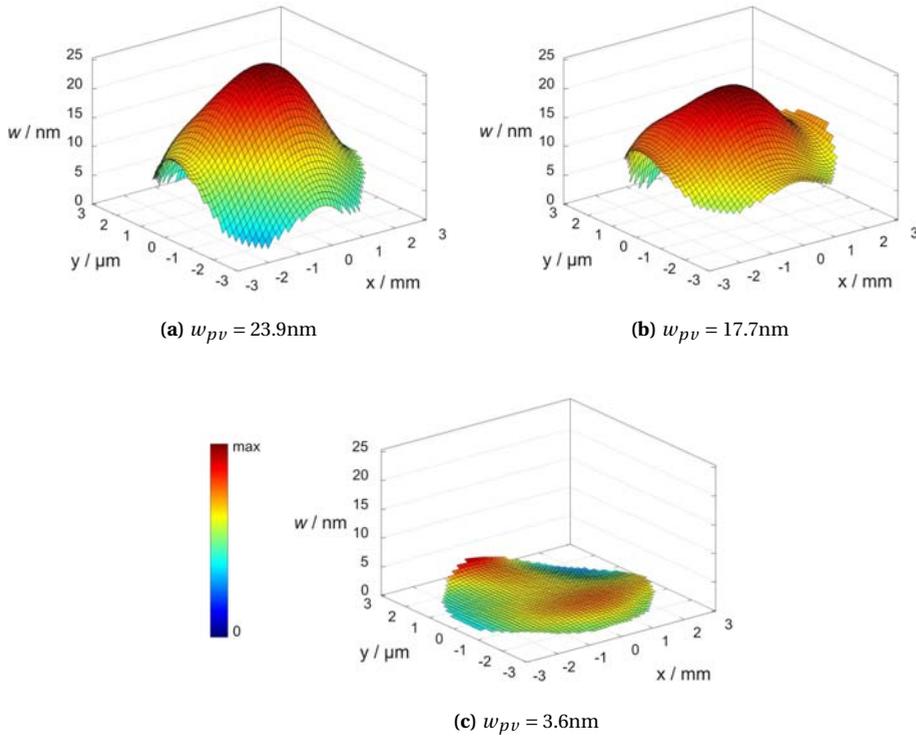


Abbildung 8.4: Wellenfrontdeformation des Testlasers bei Bestrahlung der Probe und Delay $82\mu\text{s}$ (a) bzw. $122\mu\text{s}$ (b). (c) zeigt Wellenfrontfluktuationen des Testlasers [17].

Die Messdaten des Hartmann-Sensors liegen auf einem kreisförmigen Gebiet mit Auswerterradius $a = 2.85\text{mm}$ vor und wurden auf ein 1500×1500 -Gitter übertragen. Die Intensität wurde durch bikubische Splines interpoliert, alle Gitterpunkte außerhalb des Auswertebereichs wurden null gesetzt. Das Integral (8.5) wurde dann durch Fast Fourier Transformation gelöst [144]. Die laterale Auflösung des Verfahrens, $L\lambda/(2a)$, ist ausreichend für die zu erwartende Ausdehnung der Verformungen.

8.3.2 Messergebnisse

Eine typische Fluktuation des Teststrahls (64 gemittelte Aufnahmen mit 25ms Belichtungszeit) ist in Abbildung 8.4c dargestellt und beträgt hier $w_{pv} = 3.6\text{nm}$. Im Mittel beträgt die Abweichung 2.1nm mit einer Standardabweichung von 1.1nm . Die absolute Höhe der Wellenfrontaberrationen des Teststrahls wurde gegen die HeNe-Referenzaufnahme gemessen und beträgt nach Raumfilterung noch etwa 20nm w_{rms} . Die relative Wellenfront des Strahls bei verformter und relaxierter Probe ist in 8.4a für das Delay $82\mu\text{s}$ (am Ende des Röntgen-Pulszugs) und in 8.4b für $122\mu\text{s}$ dargestellt und erreicht $w_{pv} = 23.9\text{nm}$ bzw. 17.7nm .

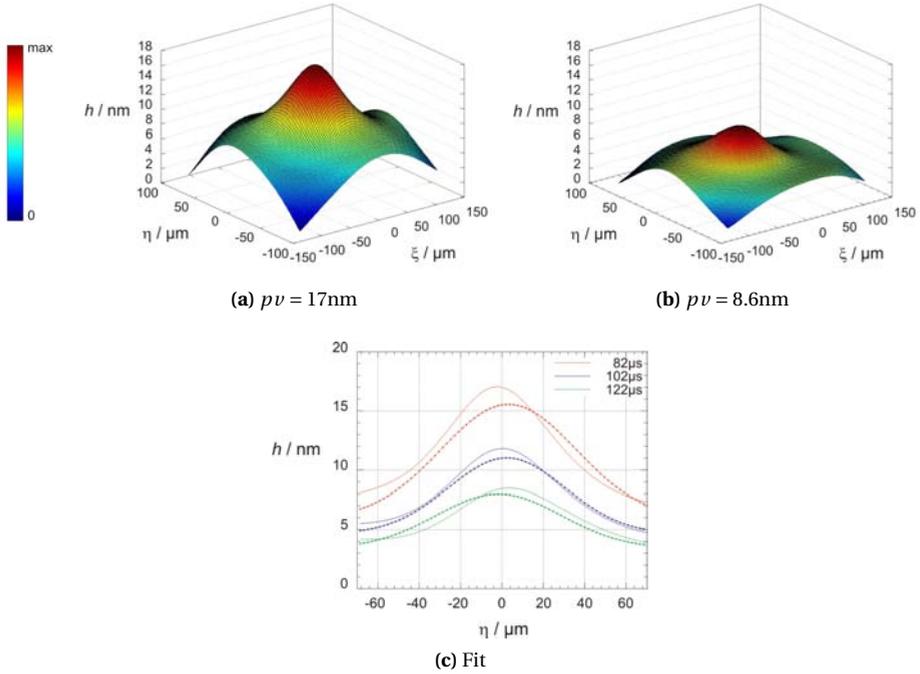


Abbildung 8.5: Rekonstruierte Oberflächenprofile für $82\mu\text{s}$ (a) und $122\mu\text{s}$ (b) Delay. Abbildung (c) zeigt einen Schnitt entlang $\xi = 0$ durch das Oberflächenprofil (durchgezogene Linie) und die Ausgleichsrechnung mit einer zweidimensionalen Gaußfunktion für die Delay-Zeiten $82\mu\text{s}$, $102\mu\text{s}$, $122\mu\text{s}$ [17].

Die laterale Ausdehnung der Wellenfrontdeformation ist im Bereich von Millimetern und somit deutlich größer als auf der Probe. Zum einen ist dies schlicht durch die Divergenz des Teststrahls bedingt, zum anderen aber auch durch Beugung. Das Profil der Probenoberfläche wurde wie im vorhergehenden Abschnitt 8.3.1 beschrieben berechnet. Die aus den in Abbildung 8.4 gezeigten Wellenfronten berechneten Profile sind in 8.5a für Delay $82\mu\text{s}$ und in 8.5b für $122\mu\text{s}$ dargestellt. Die Oberflächen zeigen im Zentrum eine näherungsweise Gaußfunktions-förmige Struktur, deren Breite etwa dem Fokaldurchmesser des Röntgenstrahls entspricht und zusätzlich einen breiteren Untergrund.

Das Null-Niveau der Oberflächendeformation ist mit einem Hartmann-Shack-Sensor nicht bestimmbar, da der Piston-Term a_{000} nicht gemessen werden kann. Hier wurde es dem Parameter h_0 der Ausgleichsrechnung mit der zweidimensionalen Gaußfunktion

$$h(\xi', \eta') = h_0 + h_1 \exp \left[-\frac{\xi'(\beta, \xi_0)^2}{2\sigma_\xi^2} - \frac{\eta'(\beta, \eta_0)^2}{2\sigma_\eta^2} \right] \quad (8.7)$$

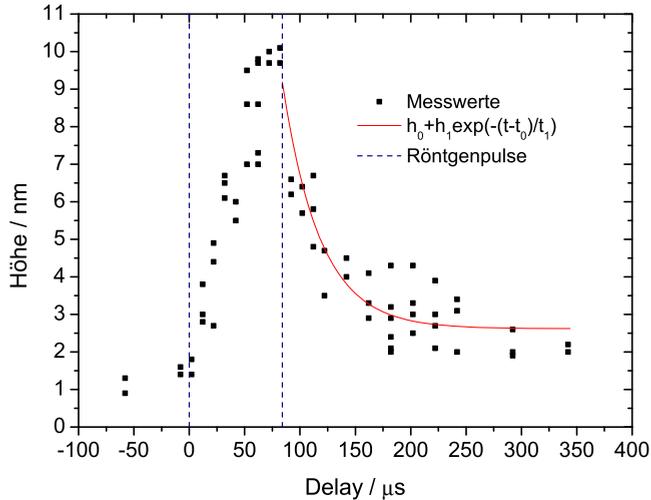


Abbildung 8.6: Höhe der thermischen Verformung an der Probenoberfläche in Abhängigkeit des Delays. Die rote Linie zeigt die angepasste Exponentialfunktion mit $t_1 = 31.1\mu\text{s}$. Die gestrichelten blauen Linien zeigen Beginn und Ende des Pulszugs an.

entnommen, wobei $\xi'(\beta, \xi_0)$ und $\eta'(\beta, \eta_0)$ laterale Koordinaten in der Probenebene sind, die auch eine Dezentrierung (ξ_0, η_0) und Drehung (β) der Gaußfunktion in der Ebene beschreiben können. Ein Vergleich der Fitfunktion mit einzelnen rekonstruierten Oberflächenprofilen ist in Abbildung 8.5c anhand eines Schnitts entlang $\xi = 0$ dargestellt.

Der Parameter h_1 beschreibt die maximale Höhe der Verformung und betrug in den Messungen maximal 9.9nm. In Abbildung 8.6 sind die die Werte für h_1 aus den einzelnen Messungen über dem Delay aufgetragen. Der Pulszug beginnt bei $t = 0$ und die Deformation wächst zunächst mit der Pulsanzahl innerhalb des Pulszuges. Nach $84\mu\text{s}$ bzw. 120 Pulsen endet der Pulszug und die Siliziumprobe relaxiert. Anpassen der Funktion $h = h_0 + h_1 \exp(-(t - t_0)/t_1)$ an die Werte von h_1 liefert die Zeitkonstante $t_1 = 31.1 \pm 6\mu\text{s}$.

8.4 Vergleich mit FEM Simulationen

Zum Vergleich wurden am European XFEL FEM- (Finite Element Method) Simulationen durchgeführt (Simulationsprogramm Ansys 12.1). Dabei wurde ein Viertel eines Zylinders (Winkel $\in [0, \pi/2]$, volle Länge) mit Radius $300\mu\text{m}$ und Länge $600\mu\text{m}$ simuliert [17]. Die absorbierte Energie pro Volumen P wurde so modelliert, dass sie an der

Oberfläche der Probe dem Strahlprofil folgt und dann exponentiell mit der Tiefe in der Probe abnimmt (Lambert-Beersches Gesetz) [17]

$$P = \frac{p_0}{V} \exp \left[-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right] \exp \left[-\frac{z}{l_a} \right] \quad (8.8)$$

mit der Absorptionslänge $l_a = 442\mu\text{m}$ von 15keV-Strahlung in Silizium, dem Absorptionsvolumen $V = \pi\sigma_x\sigma_y l_a$ (Fokusgröße $\sigma_x = 52.2\mu\text{m}$, $\sigma_y = 27.2\mu\text{m}$ aus der Schneidekanten-Messung) und der mittleren Leistung $p_0 = 3.72\text{W}$ über einen Pulszug. Die in der Simulation verwendeten Materialkonstanten für Silizium in (111)-Orientierung und die richtungsunabhängigen Konstanten für Platin sind der Veröffentlichung [175] entnommen und in Tabelle 8.1 zusammengefasst.

Material	ρ g/cm ³	ν	E GPa	α 10 ⁻⁶ /°C	λ W/m°C	c J/g°C
Si (111)	2.34	0.26	187	2.56·10 ⁻⁶	163.3	0.703
Pt	21.4	0.36	275	9.0·10 ⁻⁶	71.6	0.133

Tabelle 8.1: Dichte ρ , Poissonzahl ν , Youngscher Modul E , linearer Ausdehnungskoeffizient α , thermische Leitfähigkeit λ und spezifische Wärme c von Silizium (111) und Platin.

Für die unbeschichtete Probe wurde ein maximaler Temperaturanstieg von 9.2K und die maximale Verschiebung eines Oberflächenelements von 3.9nm bestimmt [17]. Die Relaxation konnte bis $t = 300\mu\text{s}$ durch eine abnehmende Exponentialfunktion mit einer Zeitkonstante 41.6 μs beschrieben werden. Danach klingt die Höhe in einem deutlich langsameren Prozess bis auf 0.8nm nach 1ms ab. In einer weiteren Simulation wurde die Platin-Beschichtung berücksichtigt, indem eine homogene Absorption von insgesamt 3% in der Schicht angenommen wurde, gefolgt von der Absorption im Silizium-Substrat nach Gleichung (8.8). Es wurden die maximale Temperaturerhöhung 11.3K, die maximale Höhe der Oberflächendeformation 4.2nm und eine Zeitkonstante 40.6 μs bestimmt. Die Beschichtung zeigt keinen starken Effekt auf die thermische Ausdehnung, da 97% der Strahlenergie im Siliziumsubstrat absorbiert werden. Dennoch wächst die maximale Höhe der Verformung wegen des größeren Ausdehnungskoeffizienten von Platin etwas an.

8.5 Diskussion und Vergleich der Ergebnisse

Die berechneten Oberflächenprofile zeigen eine zentrale Deformation, lateral etwa so weit ausgedehnt wie der Pumpstrahl, die 9.2nm Höhe erreicht. Ausgleichsrechnung mit einer abnehmenden Exponentialfunktion liefert die Zeitkonstante 31.1 μs . Die Simulationen haben Werte in der gleichen Größenordnung ergeben, jedoch ist die maximale Höhe nur etwa halb so groß. Ein Grund ist die Repetitionsrate der Pulszüge. Nach einer Millisekunde ist die Verformung nach den Resultaten der Simulation nur zum

Teil abgeklungen. Es ist daher zu erwarten, dass sich von Pulszug zu Pulszug des Röntgenstrahls eine Verformung des Substrats aufbaut, zu der die durch den jeweils letzten Pulszug verursachte Deformation hinzukommt. Um diesen Effekt zu reduzieren, müsste die Repetitionsrate reduziert werden, um mehr Zeit zur Relaxation der Probe zu lassen.

Inwiefern auch die Form der rekonstruierten Höhenprofile durch eine Überlagerung der Verformung aus unterschiedlichen Pulszügen erklärt werden kann, ist schwer zu beurteilen. Der Bereich, auf dem das Oberflächenprofil berechnet wurde, konnte hier nicht vergrößert werden, da in Bereichen mit sehr geringer Intensität Artefakte auftreten. Diese entstehen, weil die Reflexion durch einen Phasenfaktor beschrieben wird, der aus der Division zweier Amplituden hervorgeht.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei Wellenfrontsensoren für den EUV- und weichen Röntgen-Spektralbereich entwickelt und an den Freien-Elektronen-Lasern FLASH in Hamburg und LCLS in Stanford zur Wellenfrontmessung und Strahlcharakterisierung eingesetzt.

Beide Sensoren arbeiten nach dem Hartmann-Prinzip und sind freitragende, kompakte Systeme, die direkt an einer Vakuumkammer befestigt werden können. Im Gegensatz zu Standardverfahren der Strahlcharakterisierung durch Intensitätsmessungen nahe der Strahltaile werden die Sensoren außerhalb der Fokalebene eingesetzt, die dadurch einem Experiment zur Verfügung stehen kann. Die Schwerpunkte der Teilstrahlen werden mit einer CCD-Kamera bestimmt, sodass eine schnelle Auswertung möglich ist.

Es wurden drei Verfahren zur Kalibrierung der Sensoren getestet: Referenzmessung an einer lasergetriebenen Plasmaquelle, absolute Kalibrierung durch Annahme einer fehlerfreien Sensor-Geometrie und Erzeugung einer sphärischen Welle im Fernfeld einer Lochblende. Das letzte Verfahren hat sich als das zuverlässigste erwiesen, weil es vor Ort durchgeführt werden kann und durch mechanische Bauteiltoleranzen hervorgerufene Fehler reduziert. Die hohe Energie der FLASH-Pulse erlaubt kleine Blendendurchmesser, sodass im Einzelpuls bei der Wellenlänge $\lambda = 13\text{nm}$ Wiederholgenauigkeiten von $\lambda/19$ und $\lambda/116$ bezogen auf die Irregularität (w_{pv}) bzw. die Wellenfrontraugigkeit (w_{rms}) erreicht wurden.

Bei Messungen ohne Fokussierspiegel wurden typische Schwankungen des Strahldurchmessers ($\pm 5\%$), der Strahlage ($\pm 5\%$ Strahlradius) und der Intensität ($\pm 45\%$) der FLASH-Pulse gemessen. Die Wellenfront ist leicht astigmatisch bei ansonsten glatter Form mit einer guten mittleren Rauigkeit von 0.7nm . Die Intensität ist in horizontaler Richtung moduliert, ein Verhalten, das auch an LCLS beobachtet wurde und durch Formabweichungen der Spiegel hervorgerufen werden kann. Die Berechnung der Beugungsmaßzahl aus den Messwerten der Hartmannmessung, die keine Information über den Kohärenzgrad enthalten, liefert einen Wert nahe eins und reflektiert die hohe Qualität der Wellenfront und das nicht zu stark strukturierte Strahlprofil. Eine an das Gauß-Schell-Modell angelehnte Abschätzung inklusive der Einflüsse der partiellen Kohärenz liefert $M^2 = 3.5$ und zeigt, dass die partielle Kohärenz einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die Strahlqualität hat.

An den Beamlines mit fokussiertem Strahl wurden die Spiegel justiert, Strahlparameter bestimmt und vergleichende Strahlprofilmessungen nach ISO 11146 um die Strahltaile mit einer EUV-Kamera und durch PMMA-Ablation durchgeführt. Infolge der Justage des Spiegels konnte w_{rms} an den Beamlines bis zu 72% reduziert werden (w_{pv} bis zu 81%), wobei die dominierende Aberration der durch falsche Spiegelstellung hervorgerufene Astigmatismus ist. Die Messungen haben gezeigt, dass der Strahl nach Justage des Spiegels in guter Näherung einfach-astigmatisch behandelt werden kann.

Die Vergleichswerte der Strahlprofilmessungen haben die Eignung des Hartmann-Sensors zur Bestimmung der Strahlparameter unter den Bedingungen einer EUV-FEL-Beamline demonstriert und zeigen die speziellen Vorteile der jeweiligen Verfahren auf.

Neben dem geringeren experimentellen Aufwand ist die Einzelpuls-Auflösung die besondere Stärke des Hartmann-Sensors.

Aus den Strahlprofilen wurde erstmals die Wignerfunktion eines FEL-Strahls im EUV-Spektralbereich rekonstruiert. Der dabei getroffene Separationsansatz in horizontaler und vertikaler Richtung erweist sich als gute Näherung. Es wurde der globale Kohärenzgrad $K = 0.11$ und eine recht gute Wellenfront gemessen, die hauptsächlich Astigmatismus zeigt. Beides zusammen genommen bedeutet, dass die partielle Kohärenz die Propagationseigenschaften wesentlich mitbestimmt.

Dank des weitgehend achromatischen Messverfahrens konnte der für FLASH-Wellenlängen entwickelte Hartmann-Sensor in der Startphase der Linac Coherent Light Source zur Charakterisierung des Strahls bei 1.5nm eingesetzt werden. Auffällig ist die gute Stabilität des Strahls, die sich in Schwankungen der Strahlage von etwa $\pm 0.5\%$ des Strahlradius und einem von Puls zu Puls stabilen Intensitätsprofil ausdrückt. Die horizontale Modulation der Intensität ist stark ausgeprägt und verdeutlicht die hohen Anforderungen an die Formtreue der optischen Flächen, die sich aus der Kombination von kurzer Wellenlänge und hoher Kohärenz der Strahlung ergibt.

Während die Messungen an FLASH unter anderem der Eliminierung der statischen Aberrationen durch Korrektur der Spiegelstellung dienen, können in Zukunft durch höhere Pulsenergien und gestiegene Anforderungen an die Wellenfront auch dynamische Verformungen des Spiegels die strengen Anforderungen an die Formtreue verletzen. Zur zeitaufgelösten Untersuchung der Verformungen wurde ein Pump-Probe-Experiment entwickelt und an der European Synchrotron Radiation Facility durchgeführt. Dabei wird eine Siliziumprobe lokal durch harte Röntgenstrahlung aufgeheizt und die transiente Oberflächendeformation mit einem gepulsten Infrarotlaser und einem Hartmann-Shack-Sensor vermessen.

Basierend auf den beschriebenen Ergebnissen dieser Arbeit ergibt sich eine Reihe möglicher Verbesserungen und natürlicher Fortsetzungen der Experimente. Zum besseren Verständnis des Deformationsprozesses sollte die durch nur einen einzelnen Röntgenpuls verursachte Verformung zeitaufgelöst beobachtet werden. Dafür wäre nach den ersten Erfahrungen in diesem Experiment eine Messgenauigkeit von etwa 0.1\AA erforderlich. Vergleichbare Werte wurden unter Laborbedingungen am LLG bei photothermischen Messungen an DUV-Optiken erreicht. Es erscheint trotz der zusätzlichen Schwierigkeiten (Vibrationen, Luftzirkulation, Stabilität des gepulsten Testlaser, laterale Vergrößerung) möglich, diese Messgenauigkeit auf ein zeitaufgelöstes Experiment an einer Synchrotron-Beamline zu übertragen. Zur Vergrößerung des Teststrahls könnte ein Teleskop eingesetzt werden.

Die Messungen an FLASH haben gezeigt, dass eine zusätzliche, die Messung mit dem Hartmann-Sensor begleitende Kohärenzinformation die Genauigkeit der Strahlparameter deutlich erhöhen kann. Diese kann aus einer verbesserten Rekonstruktion der Wignerfunktion stammen. Durch Wahl eines geeigneten ABCD-Systems mit einem zusätzlichen Freiheitsgrad kann die volle, vierdimensionale Wignerfunktion berechnet werden. Entsprechende Verfahren wurden im sichtbaren und UV-Bereich demonstriert (siehe z. B. [38]). Für den Einsatz an Freie-Elektronen-Lasern im EUV- und Röntgen-Spektralbereich müssen Anpassungen vorgenommen werden (reflektive Op-

tiken, geeignete Abschwächung, Wahl des Detektors, Vakuumtauglichkeit), die zum Teil im Rahmen dieser Arbeit bereits geleistet wurden.

Wegen der Schwankungen des SASE FEL-Strahls sind zusätzlich Verfahren, die einzelne Pulse auflösen können, für eine vollständige Charakterisierung notwendig. Der Ansatz des „Extended Hartmann-Shack-Sensors“ erfüllt diese Anforderung und liefert Phase, Intensität und ein Maß für die Kohärenzlänge durch eine zusätzliche Fernfeldmessung [145]. Die kohärenzbedingten Unsicherheiten der Strahlparameter können so vollständig eliminiert werden. Die Anpassung des Verfahrens an den EUV-Spektralbereich sollte mit einer veränderten Geometrie und reflektiven Optiken möglich sein, eine wesentliche Hürde stellt die Herstellung eines Strahlteilers dar.

Insgesamt wird eine geeignete Wellenfrontdiagnostik auch in Zukunft benötigt werden, um die guten Strahleigenschaften und die experimentellen Möglichkeiten der Freie-Elektronen-Laser im Röntgen-Spektralbereich zu nutzen. Darüber hinaus werden die Anforderungen an die Messtechnik weiter steigen durch noch kürzere Wellenlängen bei gleichbleibend hoher Kohärenz.

A Anhang

A.1 Liste verwendeter Definitionen, Abkürzungen und Symbole

ABCD-Matrix (4x4)	M
ABCD-Untermatrizen (2x2)	A, B, C, D
Auswerteradius Wellenfront	a
Beugungsmaßzahl	M^2
Beugungsmaßzahl einfach-astigmatisch	M_{ea}^2
Brechungsindex	n
komplex konjugiert	$c. c.$
Definitionshelligkeit, Strehl	D_s
Divergenz	θ
Eikonal	\mathcal{S}
elektrische Feldstärke	E
elektrische Flussdichte	D
elektromagnetisch	EM
Elektronenmasse	m_e
Elementarladung	e
Energiedichte elektromagnetisches Feld	w_{em}
European Synchrotron Radiation Facility	ESRF
Extremes Ultraviolett	EUV
Fouriertransformation	$\mathcal{F}[f(x)](k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx}$
Freie-Elektronen-Laser	FEL
Freie-Elektronen-Laser in Hamburg	FLASH
Frequenz (EM Welle)	ν
Fresnelzahl	N_F
Halbwertsbreite	FWHM (Full Width at Half Maximum)
globaler Kohärenzgrad	K
Gradient	∇
Gouy-Phase	ψ
Intensität	$I(x, y)$
Irregularität Wellenfront	w_{pv}
Kohärenzgrad	$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$
komplexer Kohärenzgrad	$\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)$
komplexer Kohärenzgrad (monochrom.)	$j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

komplex konjugierte von x	x^*
Kreisfrequenz (EM Welle)	ω
Krümmungsradius	R
Laplace-Operator	Δ
Laser-Laboratorium Göttingen	LLG
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	c
Linac Coherent Light Source	LCLS
Lorentzfaktor	$\gamma = \left[1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right]^{-1/2}$
Matrix der 2. Momente	P
magnetische Feldstärke	H
magnetische Flussdichte	B
Moment der Wignerfunktion	$\langle x^i y^j u^k v^l \rangle$
Mutual Coherence Function (wechselseitige Kohärenzfunktion)	MCF
Mutual Intensity (wechselseitige Intensität)	MI
Nahes Infrarot	NIR
Natürliche Zahlen mit 0	\mathbb{N}_0
normierter, transversaler Poynting-Vektor	$\hat{\mathbf{S}} = \mathbf{S}/I$
optische Achse	z
Ortsvektor	$\mathbf{r} = (x, y, z) = (\mathbf{x}, z)$
Permeabilität, relativ	μ_r
Permeabilität, Vakuum	μ_0
Permittivität, relativ	ϵ_r
Permittivität, Vakuum	ϵ_0
Phasenraumvektor	$(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = (x, y, u, v)$
Poynting-Vektor	$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$
q -Parameter GSM	q
Rayleighlänge	z_R
Self-Amplified Spontaneous Emission	SASE
skalare reellwertige Amplitude	A
skalare komplexwertige Amplitude allgemein	$V(\mathbf{r}, t)$
mit harmonischer Zeitabhängigkeit	$u(\mathbf{r})$
skalare reellwertige Amplitude	A
Standardabweichung	σ
Strahldurchmesser	d
Strahlvektor	$\mathbf{r} = (x, y, \partial_z x, \partial_z y)$

Taillendurchmesser	d_0
Taillenlage	z_0
Transponierte der Matrix M	M^T
Transversal-Elektromagnetische Welle	TEM
transversale Komponenten (Index)	\perp
transversaler Poynting-Vektor	\mathbf{S}_\perp
Vektorprodukt	\times
Vektor der ersten Momente	\mathbf{t}
wechselseitige Intensität (MI)	$J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$
wechselseitige Kohärenzfunktion (MCF)	$\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2)$
wechselseitige Phase	$\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$
Wellenfront (wellenoptisch) bei $z = z_m$	$w(x, y; z_m)$
Wellenfrontgradient	$\boldsymbol{\beta}(x, y; z_m)$
Wellenfrontraugigkeit	w_{rms}
Wellenlänge	λ
Wellenvektor	\mathbf{k}
Wellenvektor, Vakuum	\mathbf{k}_0
Wignerfunktion	$h(\mathbf{x}, \mathbf{u})$

A.2 Zernikepolynome

n+m	m	k	Nr.	Zernikepolynom [71]	
0	0	0	0	1	
2	1	0	1	$\rho \cos \theta$	
		1	2	$\rho \sin \theta$	
	0	0	3	$2\rho^2 - 1$	
4	2	0	4	$\rho^2 \cos(2\theta)$	
		1	5	$\rho^2 \sin(2\theta)$	
	1	0	6	$(3\rho^2 - 2)\rho \cos(\theta)$	
		1	7	$(3\rho^2 - 2)\rho \sin(\theta)$	
	0	0	8	$6\rho^4 - 6\rho^2 + 1$	
6	3	0	9	$\rho^3 \cos(3\theta)$	
		1	10	$\rho^3 \sin(3\theta)$	
	2	0	11	$(4\rho^2 - 3)\rho^2 \cos(2\theta)$	
		1	12	$(4\rho^2 - 3)\rho^2 \sin(2\theta)$	
	1	0	13	$(10\rho^4 - 12\rho^2 + 3)\rho \cos(\theta)$	
		1	14	$(10\rho^4 - 12\rho^2 + 3)\rho \sin(\theta)$	
	0	0	15	$20\rho^6 - 30\rho^4 + 12\rho^2 - 1$	
	8	4	0	16	$\rho^4 \cos(4\theta)$
1			17	$\rho^4 \sin(4\theta)$	
3		0	18	$(5\rho^2 - 4)\rho^3 \cos(3\theta)$	
		1	19	$(5\rho^2 - 4)\rho^3 \sin(3\theta)$	
2		0	20	$(15\rho^4 - 20\rho^2 + 6)\rho^2 \cos(2\theta)$	
		1	21	$(15\rho^4 - 20\rho^2 + 6)\rho^2 \sin(2\theta)$	
1		0	22	$(35\rho^6 - 60\rho^4 + 30\rho^2 - 4)\rho \cos(\theta)$	
		1	23	$(35\rho^6 - 60\rho^4 + 30\rho^2 - 4)\rho \sin(\theta)$	
0		0	24	$70\rho^8 - 140\rho^6 + 90\rho^4 - 20\rho^2 + 1$	
10		5	0	25	$\rho^5 \cos(5\theta)$
	1		26	$\rho^5 \sin(5\theta)$	
	4	0	27	$(6\rho^2 - 5)\rho^4 \cos(4\theta)$	
		1	28	$(6\rho^2 - 5)\rho^4 \sin(4\theta)$	
	3	0	29	$(21\rho^4 - 30\rho^2 + 10)\rho^3 \cos(3\theta)$	
		1	30	$(21\rho^4 - 30\rho^2 + 10)\rho^3 \sin(3\theta)$	
	2	0	31	$(56\rho^6 - 105\rho^4 + 60\rho^2 - 10)\rho^2 \cos(2\theta)$	
		1	32	$(56\rho^6 - 105\rho^4 + 60\rho^2 - 10)\rho^2 \sin(2\theta)$	
	1	0	33	$(126\rho^8 - 280\rho^6 + 210\rho^4 - 60\rho^2 + 5)\rho \cos(\theta)$	
		1	34	$(126\rho^8 - 280\rho^6 + 210\rho^4 - 60\rho^2 + 5)\rho \sin(\theta)$	
	0	0	35	$252\rho^{10} - 630\rho^8 + 560\rho^6 - 210\rho^4 + 30\rho^2 - 1$	
	12	0			...
			0	36	$924\rho^{12} - 2772\rho^{10} + 3150\rho^8 - 1680\rho^6 + 420\rho^4 - 42\rho^2 + 1$

A.3 SASE FEL Eigenschaften

Im Rahmen des eindimensionalen Modells können wichtige SASE FEL Eigenschaften durch den FEL-Parameter [122] (auch: Pierce-Parameter)

$$\rho = \left[\frac{I}{I_A} \frac{A_{JJ}^2 K^2 \lambda_w^2}{32\pi^2 \gamma^2 \sigma_{\perp}^2} \right]^{1/3} \quad (\text{A.1})$$

ausgedrückt werden, wobei verwendet wurden: Strom des Elektronenstrahls I , Alfvén Strom $I_A = 17\text{kA}$, Standardabweichung der transversalen Elektronenverteilung σ_{\perp} , Undulatorperiode λ_w , Undulatorparameter K , Kopplungsparameter $A_{JJ} = J_0(Q) - J_1(Q)$ ($Q = K^2/[2(1 + K^2)]$, J_0 und J_1 sind Bessel-Funktionen der ersten Art), relativistischer Faktor γ . Die folgende Zusammenstellung ist der Veröffentlichung [123] entnommen und fasst Ergebnisse aus den Lehrbüchern und Veröffentlichungen [108, 128, 176] zusammen.

Verstärkungslänge Amplitude	$L_g \sim \lambda_w / (4\pi\rho)$
Sättigungslänge	$L_{sat} \sim \frac{\lambda_w}{4\pi\rho} \left[3 + \frac{\ln N_c}{\sqrt{3}} \right]$
Effektive Power of Shot Noise	$\frac{P_{sh}}{\rho P_b} \simeq \frac{3}{N_c \sqrt{\pi \ln N_c}}$
Effizienz in Sättigung	ρ
Leistungsverstärkung bei Sättigung	$G \simeq \frac{1}{3} N_c \sqrt{\pi \ln N_c}$
Kohärenzzeit bei Sättigung	$\tau_c \simeq \frac{1}{\rho\omega} \sqrt{\frac{\pi \ln N_c}{18}}$
Spektrale Bandbreite	$\sigma_{\omega} = \sqrt{\pi} \tau_c$

ω ist die Kreisfrequenz der FEL-Strahlung und $N_c = I/e\rho\omega$ die Zahl der kooperierenden Elektronen. Die Effizienz ist das Verhältnis der abgestrahlten Leistung zur Leistung des Elektronenstrahls $P_b = \gamma mc^2 I/e$.

Literatur

- [1] ACKERMANN, W. u. a.: Operation of a free-electron laser from the extreme ultraviolet to the water window. In: *Nature Phot.* 1 (2007), S. 336–342
- [2] SCHNEIDER, J.: FLASH - from accelerator test facility to the first single-pass soft x-ray free-electron laser. In: *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 43 (2010), Nr. 194001
- [3] EMMA, P. u. a.: First lasing of the LCLS x-ray FEL at 1.5Å. In: *Proceedings of the 23rd Particle Accelerator Conference*, 2009, S. 3115–3119. – TH3PBI01
- [4] Current events: Lasing achieved at SACLA, Japan's free-electron laser facility. In: *J. Synchr. Rad.* 18 (2011), Nr. 4, S. 686–687
- [5] SHINTAKE, T. u. a.: A compact free-electron laser for generating coherent radiation in the extreme ultraviolet region. In: *Nat. Phot.* 2 (2008), S. 555–559
- [6] BOCCHETTA, C. u. a.: FERMI@Elettra: Conceptual design report / Sincrotrone Trieste. 2007. – Forschungsbericht
- [7] CHAPMAN, H. u. a.: Femtosecond diffractive imaging with a soft x-ray free-electron laser. In: *Nature Phys.* 2 (2006), S. 839–843
- [8] MARCHESINI, S. u. a.: Massively parallel x-ray holography. In: *Nature Phot.* 2 (2008), S. 560–562
- [9] RICHTER, M.; AMUSIA, M.; BOBASHEV, S.; FEIGL, T.; JURANIC, P.; MARTINS, M.; SOROKIN, A.; TIEDTKE, K.: Extreme Ultraviolet Laser Excites Atomic Giant Resonance. In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), Nr. 16. – 163002
- [10] BOSTEDT, C. u. a.: Experiments at FLASH. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 601 (2009), S. 108–122
- [11] TIEDTKE, K. u. a.: The soft x-ray free-electron laser FLASH at DESY: beamlines, diagnostics and end-stations. In: *New J. Phys.* 11 (2009). – 023029
- [12] HARTMANN, J.: Bemerkung über den Bau und die Justirung von Spektrographen. In: *Z. Instrumentenkunde* 20 (1900), S. 47–58
- [13] SHACK, R.; PLATT, B.: Production and use of lenticular Hartmann screens. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 61 (1971), Nr. 5, S. 656
- [14] *ISO 11146-1: Lasers and laser-related equipment - test methods for laser beam width, divergence angle and beam propagation ratio.* 2005
- [15] FLÖTER, B.; JURANIC, P.; KAPITZKI, S.; KEITEL, B.; MANN, K.; PLÖNJES, E.; SCHÄFER, B.; TIEDTKE, K.: EUV Hartmann sensor for wavefront measurements at the Free-electron LASer in Hamburg. In: *New J. Phys.* 12 (2010). – 083015
- [16] FLÖTER, B.; JURANIC, P.; GROSSMANN, P.; KAPITZKI, S.; KEITEL, B.; MANN, K.; PLÖNJES, E.; SCHÄFER, B.; TIEDTKE, K.: Beam parameters of FLASH beamline BL1 from Hartmann wavefront measurements. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 635 (2011), S. 108–112
- [17] GAUDIN, J.; KEITEL, B.; JURGILAITIS, A.; NÜSKE, R.; GUÉRIN, L.; LARSSON, J.; MANN, K.; SCHÄFER, B.; TIEDTKE, K.; TRAPP, A.; TSCHENTSCHER, T.; YANG, F.; WULFF, M.; SINN, H.; FLÖTER, B.: Time-resolved investigation of nanometer scale deformations induced by a high flux x-ray beam. In: *Opt. Expr.* 19 (2011), S. 15516–15524
- [18] JACKSON, J.: *Classical Electrodynamics*. 3. John Wiley & Sons, 1998. – ISBN 978-0471309321
- [19] *ISO 15367-1: Lasers and laser-related equipment - terminology and fundamental aspects.* 2003

- [20] BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. 7. Cambridge University Press, 1999. – ISBN 978-0521642224
- [21] ALLEN, L. ; BEIJERSBERGEN, M. ; SPREEUW, R. ; WOERDMAN, J.: Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes. In: *Phys. Rev. A* 45 (1992), Nr. 11, S. 8185–8189
- [22] EPPICH, B.: *Die Charakterisierung von Strahlungsfeldern mit der Wigner-Verteilung und deren Messung*, Technische Universität Berlin, Diss., 1998
- [23] PFLÜGER, J.: Undulators for SASE FELs. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 445 (2000), S. 366–372
- [24] GREEN, H. ; WOLF, E.: A scalar representation of electromagnetic fields. In: *Proc. Phys. Soc. London Sect. A* 66 (1953), S. 1129–1137
- [25] WOLF, E.: A scalar representation of electromagnetic fields II. In: *Proc. Phys. Soc.* 74 (1959), S. 269–280
- [26] ROMAN, P.: A scalar representation of electromagnetic fields III. In: *Proc. Phys. Soc.* 74 (1959), S. 281–289
- [27] GLAUBER, R.: The Quantum Theory of Optical Coherence. In: *Phys. Rev.* 130 (1963), Nr. 6, S. 2529–2539
- [28] MANDEL, L. ; WOLF, E.: *Optical Coherence and Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1995. – ISBN 978-0521417112
- [29] SALDIN, E. ; SCHNEIDMILLER, E. ; YURKOV, M.: Coherence properties of the radiation from X-ray free electron laser. In: *Opt. Comm.* 281 (2008), Nr. 5, S. 1179–1188
- [30] WIGNER, E.: On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium. In: *Phys. Rev.* 40 (1932), S. 749–759
- [31] BERTRAND, J. ; BERTRAND, P.: A Tomographic Approach to Wigner's function. In: *Found. Phys.* 17 (1987), Nr. 4, S. 397–405
- [32] VOGEL, K. ; RISKEN, H.: Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase. In: *Phys. Rev. A* 40 (1989), Nr. 5, S. 2847–2849
- [33] SMITHEY, D. ; BECK, M. ; RAYMER, M.: Measurement of the Wigner Distribution and the density Matrix of a Light Mode Using Optical Homodyne Tomography: Application to Squeezed States and the Vacuum. In: *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993), Nr. 9, S. 1244–1247
- [34] KURTSIEFER, Ch. ; PFAU, T. ; MLYNEK, J.: Measurement of the Wigner function of an ensemble of helium atoms. In: *Nature* 386 (1997), S. 150–153
- [35] TRAN, C. ; WILLIAMS, G. ; ROBERTS, R. ; FLEWETT, S. ; PEELE, A. ; PETERSON, D. ; JONGE, M. de ; NUGENT, K.: Experimental Measurement of the Four-Dimensional Coherence Function for an Undulator X-Ray Source. In: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007). – 224801
- [36] SCHÄFER, B. ; FLÖTER, B. ; MEY, T. ; JURANIC, P. ; KAPITZKI, S. ; KEITEL, B. ; PLÖNJES, E. ; MANN, K. ; TIEDTKE, K.: FEL beam characterization from measurements of the Wigner distribution function. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* (2011), S. 502 – 507
- [37] BASTIAANS, M.: Application of the Wigner distribution function to partially coherent light. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 3 (1986), Nr. 8, S. 1227–1238
- [38] SCHÄFER, B. ; MANN, K.: Characterization of an ArF excimer laser beam from measurements of the Wigner distribution function. In: *New J. Phys.* 13 (2011). – 043013

- [39] WALTHER, A.: Radiometry and Coherence. In: *J. Opt. Soc. Am.* 58 (1968), Nr. 9, S. 1256–1259
- [40] BASTIAANS, M.: The Wigner distribution function of partially coherent light. In: *Opt. Acta* 28 (1981), Nr. 9, S. 1215–1224
- [41] WOLF, E.: New theory of partial coherence in the space-frequency domain. Part I: spectral and cross spectra of steady-state sources. In: *J. Opt. Soc. Am.* 72 (1982), Nr. 3, S. 343–351
- [42] COLLINS, S.: Lens-System Diffraction Integral in Terms of Matrix Optics. In: *J. Opt. Soc. Am.* 60 (1970), Nr. 9, S. 1168–1177
- [43] SIEGMAN, A.: *Lasers*. University Science Books, 1986. – ISBN 978–0935702118
- [44] SIEGMAN, A.: Hermite-gaussian functions of complex argument as optical-beam eigenfunctions. In: *J. Opt. Soc. Am.* 63 (1973), Nr. 9, S. 1093–1094
- [45] SIEGMAN, A.; SZIKLAS, E.: Mode Calculations in Unstable Resonators with Flowing Saturable Gain. 1: Hermite-Gaussian Expansion. In: *Appl. Opt.* 13 (1974), Nr. 12, S. 2775–2792
- [46] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.: *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs and Mathematical Tables*. Dover Publications, 1964. – ISBN 0–486–61272–4
- [47] MANDEL, L.; WOLF, E.: Spectral coherence and the concept of cross-spectral purity. In: *J. Opt. Soc. Am.* 66 (1976), Nr. 6, S. 529–535
- [48] BASTIAANS, M.: A frequency-domain treatment of partial coherence. In: *Opt. Acta* 24 (1977), Nr. 3, S. 261–274
- [49] CITTERT, P. van: Die wahrscheinlichste Schwingungsverteilung in einer von einer Lichtquelle direkt oder mittels einer Linse beleuchteten Ebene. In: *Physica* 1 (1934), S. 201–210
- [50] ZERNIKE, F.: The concept of degree of coherence and its application to optical problems. In: *Physica* 5 (1938), S. 785–795
- [51] SCHELL, A.: A Technique for the Determination of the Radiation Pattern of a Partially Coherent Aperture. In: *IEEE Transactions of Antennas and Propagation* 15 (1967), Nr. 1, S. 187–188
- [52] VARTANYANTS, I.; SINGER, A.: Coherence Properties of hard x-ray synchrotron sources and x-ray free-electron lasers. In: *New J. Phys.* 12 (2010). – 035004
- [53] FRIBERG, A.; SUDOL, R.: Propagation parameters of Gaussian Schell-model beams. In: *Opt. Comm.* 41 (1982), Nr. 6, S. 383–387
- [54] FRIBERG, A.; SUDOL, R.: The spatial coherence properties of gaussian Schell-model beams. In: *Opt. Acta* 30 (1983), Nr. 8, S. 1075–1097
- [55] SINGER, A.; VARTANYANTS, I.; KUHLMANN, M.; DUESTERER, S.; TREUSCH, R.; FELDHAUS, J.: Transverse Coherence Properties of the Free-Electron-Laser FLASH at DESY. In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008). – 254801
- [56] VARTANYANTS, I.: Coherence Properties of Individual Femtosecond Pulses of an X-Ray Free-Electron Laser. In: *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011). – 144801
- [57] LAVI, S.; PROCHASKA, R.; KEREN, E.: Generalized beam parameters and transformations laws for partially coherent light. In: *Appl. Opt.* 27 (1988), Nr. 17, S. 3696–3703
- [58] NEMES, G.; SIEGMAN, A.: Measurement of all ten second-order moments of an astigmatic beam by the use of rotating simple astigmatic (anamorphic) optics. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994), Nr. 8, S. 2257–2264
- [59] BASTIAANS, M.: Wigner distribution function and its application to first-order optics. In: *J. Opt. Soc. Am.* 12 (1979), S. 1710–1716

- [60] SIMON, R. ; MUKUNDA, N.: Twisted Gaussian Schell-model beams. In: *J. Opt. Soc. Am.* 10 (1993), Nr. 1, S. 95–109
- [61] WELFORD, W.: *Aberrations of Optical Systems*. Taylor and Francis, 1986. – ISBN 0852745648
- [62] HECHT, E.: *Optik*. 5. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2009. – ISBN 3–486–58861–3
- [63] MOUROULIS, P. ; MACDONALD, J.: *Geometrical Optics and Optical Design*. Oxford University Press, 1997. – ISBN 0–19–508931–6
- [64] NIJBOER, B.: The diffraction theory of optical aberrations. Part II: Diffraction pattern in the presence of small aberrations. In: *Physica* 13 (1947), Nr. 10, S. 605–620
- [65] STREHL, K.: Ueber Luftschlieren und Zonenfehler. In: *Z. Instrumentenkunde* 22 (1902), S. 213–217
- [66] STREHL, K.: Aplanatische und fehlerhafte Abbildung im Fernrohr. In: *Z. Instrumentenkunde* 15 (1895), S. 362–370
- [67] ROSS, S.: Limitations and applicability of the Maréchal approximation. In: *Appl. Opt.* 48 (2009), Nr. 10, S. 1812–1818
- [68] MARÉCHAL, A.: Etudes des effets combinés de la diffraction et des aberrations géométrique sur l'image d'un point lumineux. In: *Rev. d'Optique Theor. et Instrum.* 26 (1947), S. 257–277
- [69] Eine Demoverision der Software kann von der Homepage des Laser-Laboratoriums (<http://www.llg-ev.de>) heruntergeladen werden.
- [70] NIJBOER, B.: The diffraction theory of optical aberrations. Part I: General discussion of the geometrical aberrations. In: *Physica* 10 (1943), Nr. 8, S. 679–692
- [71] WYANT, J. ; CREATH, K.: Basic Wavefront Aberration Theory for Optical Metrology. In: SHANNON, R. (Hrsg.) ; WYANT, J. (Hrsg.): *Applied Optics and Optical Engineering* Bd. 11. Academic Press, 1992, Kapitel 1
- [72] ATTWOOD, D.: *Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications*. Cambridge University Press, 1999. – ISBN 978–0521029971
- [73] *International technology roadmap for semiconductors: 2009 edition*. <http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/Home2009.htm>, 2009
- [74] HENKE, B. ; GULLIKSON, E. ; DAVIS, J.: X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E=50–30000eV, Z=1–92. In: *At. Data and Nucl. Data Tables* 54 (1993), S. 181–342
- [75] BARBEE, T. ; MROWKA, S. ; HETTRICK, M.: Molybdenum-silicon multilayer mirrors for extreme ultraviolet. In: *Appl. Opt.* 24 (1985), Nr. 6, S. 883 – 886
- [76] HARVEY, J. ; MORAN, E. ; ZMEK, W.: Transfer function characterization of grazing incidence optical systems. In: *Appl. Opt.* 27 (1988), Nr. 8, S. 1527 – 1533
- [77] BARTY, A. ; SOUFLI, R. ; MCCARVILLE, T. ; BAKER, S. ; PIVOVAROFF, M ; STEFAN, P. ; BIONTA, R.: Predicting the coherent x-ray wavefront focal properties at the Linac Coherent Light Source (LCLS) x-ray free electron laser. In: *Opt. Expr.* 17 (2009), Nr. 18, S. 15508–15519
- [78] SAWHNEY, K. ; NANDEDKAR, R.: Imaging characteristics of toroidal and ellipsoidal mirrors for synchrotron radiation source Indus-1. In: *Pramana J. Phys.* 39 (1992), Nr. 2, S. 177 – 180
- [79] MALACARA, D.: *Optical Shop Testing*. Wiley-VCH, 2007. – ISBN 978–0–471–48404–2
- [80] KIRKPATRICK, P. ; BAEZ, A.: Formation of Optical Images by X-Rays. In: *J. Opt. Soc. Am.* 38 (1948), Nr. 9, S. 766–774

- [81] TRAN, C. ; PEELE, A. ; ROBERTS, A. ; NUGENT, K.: X-ray imaging: a generalized approach using phase-space tomography. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 22 (2005), Nr. 8, S. 1691 – 1700
- [82] SMARTT, R. ; STEEL, W.: Theory and application of point-diffraction interferometers. In: *Jpn. J. Appl. Phys.* 14 (1975), S. 351 – 356
- [83] MEDEKI, H. ; TEJNIL, E. ; GOLDBERG, K. ; BOKOR, J.: Phase-shifting point diffraction interferometer. In: *Opt. Lett.* 21 (1996), Nr. 19, S. 1526 – 1528
- [84] GOLDBERG, K. u. a.: Ultra-high accuracy optical testing: creating diffraction-limited short-wavelength optical systems. In: *Optics for EUV, X-Ray, and Gamma-Ray Astronomy II* Bd. 5900, 2005 (Proceeding of SPIE)
- [85] TALBOT, H.: Facts relating to Optical Science. No. IV. In: *Phil. Mag.* 9 (1836), Nr. 56, S. 401 – 407
- [86] GUIGAY, J.-P. ; ZABLER, S. ; CLOETENS, P. ; DAVID, C. ; MOKSO, R. ; SCHLENKER, M.: The partial Talbot effect and its use in measuring the coherence of synchrotron X-rays. In: *J. Synchr. Rad.* 11 (2004), S. 476 482
- [87] DAVID, C. ; NÖHAMMER, B. ; SOLAK, H. ; ZIEGLER, E.: Differential x-ray phase contrast imaging using a shearing interferometer. In: *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002), Nr. 17, S. 3287 – 3289
- [88] PFEIFFER, F. ; BUNK, O. ; SCHULZE-BRIESE, C. ; DIAZ, A. ; WEITKAMP, T. ; DAVID, C. ; VEEN, J. van d. ; VARTANYANTS, I. ; ROBINSON, I.: Shearing interferometer for Quantifying the Coherence of Hard X-Ray Beams. In: *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005). – 164801
- [89] SALDITT, T. ; KALBFLEISCH, S. ; OSTERHOFF, M. ; KRÜGER, S. ; BARTELS, M. ; GIEWEKEMEYER, K. ; NEUBAUER, H. ; SPRUNG, M.: Partially coherent nano-focused x-ray radiation characterized by Talbot interferometry. In: *Opt. Expr.* 19 (2011), Nr. 10, S. 9656–9675
- [90] WEITKAMP, T. ; NÖHAMMER, B. ; DIAZ, A. ; DAVID, C. ; ZIEGLER, E.: X-ray wavefront analysis and optics characterization with a grating interferometer. In: *Appl. Phys. Lett.* 86 (2005). – 054101
- [91] MIAO, J. ; CHARALAMBOUSW, P. ; KIRZ, J. ; SAYRE, D.: Extending the methodology of x-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-cryalline specimens. In: *Nature* 400 (1999), S. 342 – 344
- [92] ABBEY, B. ; NUGENT, K. ; WILLIAMS, G. ; CLARK, J. ; PEELE, A. ; PFEIFFER, M. ; JONGE, M. de ; MCNULTY, I.: Keyhole coherent diffractive imaging. In: *Nat. Phys.* 4 (2008), S. 394 – 398
- [93] RODENBURG, J. ; FAULKNER, H.: A phase retrieval algorithm for shifting illumination. In: *Appl. Phys. Lett.* 85 (2004), S. 4795 – 4797
- [94] THIEBAULT, P. ; DIEROLF, M. ; MENZEL, A. ; BUNK, O. ; DAVID, C. ; PFEIFFER, F.: High-Resolution Scanning X-ray Diffraction Microscopy. In: *Science* 321 (2008), S. 379 – 382
- [95] SCHROER, C. u. a.: Hard x-ray nanoprobe based on refractive x-ray lenses. In: *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005). – 124103
- [96] SCHROPP, A. u. a.: Hard x-ray nanobeam chracterization by coherent diffraction microscopy. In: *Appl. Phys. Lett.* 96 96 (2010), S. 091102
- [97] BRADY, G. ; FIENUP, J.: Nonlinear optimization algorithm for retrieving the full complex pupil function. In: *Opt. Expr.* 14 (2006), Nr. 2, S. 474 – 486
- [98] YUMOTO, H. ; MIMURA, H. ; MATSUYAMA, S. ; HANDA, S. ; SANO, Y.: At-wavelength figure metrology of hard x-ray focusing mirrors. In: *Rev. Sci. Instrum.* 77 (2006). – 063712

- [99] MIMURA, H. u. a.: Breaking the 10nm barrier in hard-X-ray focusing. In: *Nat. Phys.* 6 (2010), S. 122 – 125
- [100] MIMURA, H. u. a.: Corrigendum: Breaking the 10nm barrier in hard-X-ray focusing. In: *Nat. Phys.* 6 (2010), S. 146
- [101] MOTZ, H.: Application of the Radiation from Fast Electrons Beams. In: *J. Appl. Phys.* 22 (1951), Nr. 5, S. 527–535
- [102] SCHMÜSER, P.; DOHLUS, M.; ROSSBACH, J.: Ultraviolet and Soft X-Ray Free-Electron Lasers: Introduction to Physical Principles, Experimental Results, Technological Challenges. In: *Springer Trac. Mod. Phys.* 229 (2008)
- [103] ALS-NIELSEN, J.: *Elements of Modern X-Ray Physics*. Wiley, 2001. – ISBN 978-0471498582
- [104] PHILLIPS, R.: The Ubitron, a High Power Travelling-Wave Tube Based on a Periodic Beam Interaction in Unloaded Waveguide. In: *IRE Trans. Electron Devices* 7 (1960), Nr. 4, S. 231–241
- [105] PHILLIPS, R.: History of the Ubitron. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 272 (1988), S. 1–9
- [106] MADEY, J.: Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field. In: *J. Appl. Phys.* 42 (1971), Nr. 5, S. 1906–1913
- [107] MADEY, J.; SCHWETTMAN, H.; FAIRBANK, W.: A Free Electron Laser. In: *IEEE Nucl. Sci.* 20 (1973), S. 980–983
- [108] SALDIN, E.; SCHNEIDMILLER, E.; YURKOV, M.: *The Physics of Free Electron Lasers*. Springer, 2000. – ISBN 978-3-540-66266-2
- [109] ROSSBACH, J.; SALDIN, E.; SCHNEIDMILLER, E.; YURKOV, M.: Interdependence of parameters of an X-ray FEL. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 374 (1996), S. 401 – 407
- [110] SALDIN, E.; SCHNEIDMILLER, E.; YURKOV, M.: Calculation of energy diffusion in an electron beam due to quantum fluctuations of undulator radiation. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 381 (1996), S. 545 – 547
- [111] ELIAS, L.; FAIRBANK, W.; MADEY, J.; SCHWETTMAN, A.; SMITH, T.: Observation of Stimulated Emission of Radiation by Relativistic Electrons in a Spatially Periodic Transverse Magnetic Field. In: *Phys. Rev. Lett.* 36 (1976), Nr. 13, S. 717–720
- [112] DEACON, D.; ELIAS, L.; MADEY, J.; RAMIAN, G.; SCHWETTMAN, A.; SMITH, T.: First Operation of a Free-Electron Laser. In: *Phys. Rev. Lett.* 38 (1977), Nr. 16, S. 892–894
- [113] GOLDSTEIN, J.; MCVEY, B.; ELLIOTT, C.: Conceptual design of a 50nm FEL oscillator and a 20-40nm SASE amplifier. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 272 (1988), S. 177–182
- [114] GOLDSTEIN, J.; MCVEY, B.; NEWNAM, B.: Optical design and performance of an XUV FEL oscillator. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 296 (1990), S. 288 – 291
- [115] KORTRIGHT, J.: Extreme Ultraviolet and Soft X-Ray Optics for Free Electron Lasers. In: *Laser Handbook* Bd. 6. Elsevier, 1990. – ISBN 0-444-86953-0, Kapitel 13, S. 463 – 483
- [116] LAMBERT, G. u. a.: Injection of harmonics generated in gas in a free-electron laser providing intense and coherent extreme-ultraviolet light. In: *Nat. Phys.* (2008), Nr. 4, S. 296 – 300
- [117] FELDHAUS, J.; SALDIN, E.; SCHNEIDER, J.; SCHNEIDMILLER, E.; YURKOV, M.: Possible application of X-ray optical elements for reducing the spectral bandwidth of an X-ray SASE FEL. In: *Opt. Comm.* 140 (1997), S. 341–352

- [118] BARLETTA, W.A. u. a.: Free electron lasers: Present status and future challenges. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 618 (2010), S. 69–96
- [119] RATNER, D. u. a.: Second and third harmonic measurements at the linac coherent light source. In: *Phys. Rev. Spec. Top. Acc. Beams* 14 (2011). – 060701
- [120] DÜSTERER, S. u. a.: Spectroscopic characterization of vacuum ultraviolet free electron laser pulses. In: *Opt. Lett.* 31 (2006), Nr. 11, S. 1750 – 1752
- [121] KONDRATENKO, A. ; SALDIN, E.: Generation of Coherent Radiation by a Relativistic Electron Beam in an Undulator. In: *Part. Accelerators* 10 (1980). – 207
- [122] BONIFACIO, R. ; PELLEGRINI, C. ; NARDUCCI, L.: Collective Instabilities and high-gain regime in a free-electron laser. In: *Opt. Comm.* 50 (1984), Nr. 6, S. 373 – 378
- [123] SALDIN, E. ; SCHNEIDMILLER, E. ; YURKOV, M.: Statistical and coherence properties of radiation from x-ray free-electron lasers. In: *New. J. Phys.* 12 (2010). – 035010
- [124] MOORE, G.: High-gain small-signal modes of the free electron laser. In: *Opt. Comm.* 52 (1984), Nr. 1, S. 46 – 51
- [125] SALDIN, E. ; SCHNEIDMILLER, E. ; YURKOV, M.: Diffraction effects in the self-amplified spontaneous emission FEL. In: *Opt. Comm.* 186 (2000), S. 185 – 209
- [126] COLSON, W.: Classical Free Electron Laser Theory. In: *Laser Handbook* Bd. 6. Elsevier, 1990. – ISBN 0-444-86953-0, Kapitel 5, S. 115 – 194
- [127] HUANG, Z. ; KIM, K.-J.: A review of X-ray Free-Electron Laser theory. In: *Phys. Rev. Spec. Top. Acc. Beams* 10 (2007). – 0344801
- [128] SALDIN, E. ; SCHNEIDMILLER, E. ; YURKOV, M.: Statistical properties of radiation from VUV and X-ray free electron laser. In: *Opt. Comm.* 148 (1998), S. 383 – 403
- [129] REICHE, S.: GENESIS 1.3: a fully 3D time-dependent FEL simulation code. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 429 (1999), S. 243–248
- [130] SALDIN, E. ; SCHNEIDMILLER, E. ; YURKOV, M.: FAST: a three-dimensional time-dependent FEL simulation code. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 429 (1999), S. 233 – 237
- [131] SCHREIBER, S.: Commissioning of the VUV-FEL injector at TTF. In: *Proc. EPAC 2004*, 2004, S. 351 – 353
- [132] KRASILNIKOV, M. u. a.: Optimizing the PITZ electron source for the VUV-FEL. In: *Proc. EPAC 2004*, 2004, S. 360 – 362
- [133] AYVAZYAN, V. u. a.: First operation of a free-electron laser generating GW power radiation at 32nm wavelength. In: *Eur. Phys. J. D* 37 (2006), S. 297 – 303
- [134] WEISE, H.: Superconducting RF structures - test facilities and results. In: *Proc. Part. Acc. Conf. 2003* Bd. 5, 2003 (IEEE Conf. Proc.), S. 673 – 677
- [135] SCHNEIDER, J. u. a.: FLASH. The Free-Electron Laser in Hamburg / Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY. 2007. – Forschungsbericht
- [136] LIMBERG, T. ; PIOT, Ph. ; STULLE, F.: Design and performance simulation of the TTF-FEL II bunch compression system. In: *Proc. EPAC 2002*, 2002, S. 811 – 813
- [137] DÜSTERER, S. u. a.: Photon Science 2010: Highlights and HASYLAB Annual Report / Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB. 2010. – Forschungsbericht
- [138] GENSCHE, M. u. a.: New infrared undulator beamline at FLASH. In: *Infrared Phys. Technol.* (2008), S. 423 – 425

- [139] HAHN, U. ; TIEDTKE, K.: The gas attenuator of FLASH at DESY. In: *AIP Conf. Proc.* (2007), S. 276 – 282
- [140] *LCLS Parameter Database*. – <http://ssrl.slac.stanford.edu/lcls/parameters.html>
- [141] MOELLER, S. u. a.: Photon beamlines and diagnostics at LCLS. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 635 (2011), Nr. 1, S. S6–S11
- [142] NOLL, R.: Phase estimates from slope-type wave-front sensors. In: *J. Opt. Soc. Am.* 68 (1978), Nr. 1, S. 139–140
- [143] CUBALCHINI, R.: Modal wave-front estimation from phase derivative measurements. In: *J. Opt. Soc. Am.* 69 (1979), Nr. 7, S. 972–977
- [144] PRESS, W. ; TEUKOLSKY, S. ; VETTERLING, W. ; FLANNERY, B.: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. 2. Cambridge University Press, 1992. – ISBN 0–521–43108–5
- [145] SCHÄFER, B. ; MANN, K.: Determination of beam parameters and coherence properties of laser radiation by use of an extended Hartmann-Shack wave-front sensor. In: *Appl. Opt.* 41 (2002), Nr. 15, S. 2809–2817
- [146] BACHELARD, R. ; MERCÈRE, P. ; IDIR, M. ; COUPRIE, M.-E. ; LABAT, M. ; CHUBAR, O. ; LAMBERT, G. ; ZEITOUN, Ph. ; KIMURA, H. ; OHASHI, H. ; HIGASHIYA, A. ; YABASHI, M. ; NAGASONO, M. ; HARA, T. ; ISHIKAWA, T.: Wavefront Analysis of Nonlinear Self-Amplified Spontaneous-Emission Free-Electron Laser Harmonics in the Single-Shot Regime. In: *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011). – 234801
- [147] Es werden die Ergebnisse einer Kooperation zwischen dem Laser-Laboratorium Göttingen und dem Deutschen Elektronen-Synchrotron präsentiert. Beteiligte Wissenschaftler: B. Flöter, P. Juranic, P. Großmann, S. Kapitzki, T. Mey, B. Keitel, K. Mann, E. Plönjes, B. Schäfer und K. Tiedtke.
- [148] MERCÈRE, P. ; ZEITOUN, P. ; IDIR, M. ; PAPE, S. L. ; DOUILLET, D. ; LEVEQ, X. ; DOVILLAIRE, G. ; BUCOURT, S. ; GOLDBERG, K. ; NAULLEAU, P. ; REKAWA, S.: Hartmann wave-front measurement at 13.4nm with $\lambda_{EUV}/120$ accuracy. In: *Opt. Lett.* 28 (2003), Nr. 17, S. 1534–1536
- [149] PETH, C. ; BARKUSKY, F. ; MANN, K.: Near-edge x-ray absorption fine structure measurements using a laboratory-scale XUV source. In: *J. Phys. D Appl. Phys.* 41 (2008), Nr. 105202
- [150] KUHLMANN, M. u. a.: Wave-Front observations at FLASH. In: *Proceedings of FEL 2006*, 2006, S. 794 – 797
- [151] BARKUSKY, F. ; BAYER, A. ; PETH, C. ; MANN, K.: Direct photoetching of polymers using radiation of high energy density from a table-top extreme ultraviolet plasma source. In: *J. Appl. Phys.* 105 (2009), Nr. 1. – 014906
- [152] CHALUPSKY, J. u. a.: Characteristics of focused soft X-ray free-electron laser beam determined by ablation of organic molecular solids. In: *Opt. Expr.* 15 (2007), Nr. 10, S. 6036 – 6043
- [153] CHALUPSKY, J. u. a.: Non-thermal desorption/ablation of molecular solids by ultra-short soft x-ray pulses. In: *Opt. Expr.* 17 (2009), Nr. 1, S. 208 – 217
- [154] DYER, P.: Excimer laser polymer ablation: twenty years on. In: *Appl. Phys. A* 77 (2003), S. 167 – 173
- [155] CHALUPSKY, J. u. a.: Spot size characterization of focused non-Gaussian X-ray laser beams. In: *Opt. Expr.* 16 (2010), Nr. 26, S. 27836 – 27845
- [156] EPPICH, B. ; MANN, G. ; WEBER, H.: Measurement of the four dimensional Wigner distribution of paraxial light sources. In: *Proc. of SPIE* Bd. 5962-2, 2005, S. D1 – D11

- [157] MARTINEZ-HERRERO, R. ; MEJIAS, P.: Expansion of the cross-spectral density function of general fields and its application to beam characterization. In: *Opt. Comm.* 94 (1992), S. 197 – 202
- [158] EPPICH, B.: Definition, meaning and measurement of coherence parameters. In: *Proc. of SPIE* Bd. 4270, 2001, S. 71 – 79
- [159] ROLING, S. ; SIEMJER, B. ; WÖSTMANN, M. ; ZACHARIAS, H. ; MITZNER, R. ; SINGER, A. ; TIEDTKE, K. ; VARTANYANTS, I.: Temporal and spatial coherence properties of free-electron-laser pulses in the extreme ultraviolet regime. In: *Phys. Rev. Spec. Top. Acc. Beams* 14 (2011). – 080701
- [160] BOZEK, J.: AMO instrumentation for the LCLS X-ray FEL. In: *Eur. Phys. J. Special Topics* 169 (2009), S. 129–132
- [161] Es werden die Ergebnisse gemeinsamer Messungen von Laser-Laboratorium Göttingen, SLAC und dem Deutschen Elektronen-Synchrotron präsentiert. Beteiligte Wissenschaftler: B. Flöter, S. Möller, J. Bozek, C. Bostedt, S. Bajt, U. Jastrow, P. Juranic, S. Kapitzki, B. Keitel, K. Mann, E. Plönjes, B. Schäfer und K. Tiedtke.
- [162] RYUTOV, D. ; BIONTA, R. ; HAU-RIEGE, S. ; KISHIYAMA, K. ; MCMAHON, D. ; ROEBEN, M.: The Physics of the Gas Attenuator for the Linac Coherent Light Source (LCLS) / SLAC National Accelerator Laboratory. 2009. – Forschungsbericht. – 108–112 S.
- [163] Es werden die Ergebnisse gemeinsamer Messungen von Laser-Laboratorium Göttingen, European XFEL und dem Deutschen Elektronen-Synchrotron an der European Synchrotron Radiation Facility präsentiert. Beteiligte Wissenschaftler: J. Gaudin, B. Keitel, A. Jurgilaitis, R. Nüske, L. Guérin, J. Larsson, K. Mann, B. Schäfer, K. Tiedtke, A. Trapp, T. Tschentscher, F. Yang, M. Wulff, H. Sinn und B. Flöter
- [164] GELONI, G. ; SALDIN, E. ; SAMOYLOVA, L. ; SCHNEIDMILLER, E. ; SINN, H. ; TSCHENTSCHER, T. ; YURKOV, M.: Coherence properties of the European XFEL. In: *New J. Phys.* 12 (2010). – 035021
- [165] ALTARELLI, M. u. a.: *The European X-Ray Free-Electron Laser: Technical design report*. DESY XFEL Project Group, 2007. – ISBN 978–3–935702–17–1
- [166] SIEWERT, F. ; BUCHHEIM, J. ; ZESCHKE, T.: Characterization and calibration of 2nd generation slope measuring profiler. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* 616 (2010), S. 119–127
- [167] SUSINI, J. ; BAKER, R. ; KRUMREY, M. ; SCHWEGLE, W. ; KVICK, A.: Adaptive x-ray mirror prototype: First results. In: *Rev. Sci. Instr.* 66 (1995), Nr. 2, S. 2048 – 2052
- [168] REVESZ, P. ; KAZIMIROV, A.: In Situ Measurements of Thermal Distortions in Synchrotron Optics under High Heat Load. In: *Synchr. Rad. News* 23 (2010), Nr. 1, S. 32 – 35
- [169] QIAN, S. ; JARK, W. ; SOSTERO, G. ; GAMBETTA, A. ; MAZZOLI, F. ; SAVOIA, A.: Precise measuring method for detecting the in situ distortion profile of a high-heat-load mirror for synchrotron radiation by use of a pentaprism long trace profiler. In: *Appl. Opt.* 36 (1997), Nr. 16, S. 3769 – 3775
- [170] CASTRO, A. de ; VASCONCELLOS, A. ; LUZZI, R.: Thermoelastic analysis of a silicon surface under x-ray free-electron-laser irradiation. In: *Rev. Sci. Instr.* 81 (2010). – 073102
- [171] CASTRO, A. de ; VASCONCELLOS, A. ; LUZZI, R.: Erratum: „Thermoelastic analysis of a silicon surface under x-ray free-electron-laser irradiation“. In: *Rev. Sci. Instr.* 82 (2011). – 049901
- [172] KOCH, J. u. a.: Experimental comparison of a Shack-Hartmann sensor and a phase-shifting interferometer for large-optics metrology applications. In: *Appl. Opt.* 39 (2000), Nr. 25, S. 4540 – 4546

- [173] PFUND, J. ; LINDLEIN, N. ; SCHWIDER, J. ; BUROW, R. ; BLÜMEL, T. ; ELSSNER, K.-E.: Absolute sphericity measurement: a comparative study of the use of interferometry and a Shack-Hartmann sensor. In: *Opt. Lett.* 23 (1998), Nr. 10, S. 742 – 744
- [174] SCHÄFER, B. ; GLOGER, J. ; LEINHOS, U. ; MANN, K.: Photo-thermal measurement of absorptance losses, temperature induced wavefront deformation and compaction in DUV-optics. In: *Opt. Expr.* 17 (2009), S. 23025–23036. – 25
- [175] WORTMAN, J. ; EVANS, R.: Young's Modulus, Shear Modulus, and Poisson's Ratio in Silicon and Germanium. In: *J. Appl. Phys.* 36 (1965), S. 153 – 156
- [176] BONIFACIO, R. ; SALVO, L. D. ; PIERINI, P. ; PIOVELLA, N. ; PELLEGRINI, C.: Spectrum, Temporal Structure, and Fluctuations in a High-Gain Free-Electron Laser Starting from Noise. In: *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), Nr. 1, S. 70 – 73

Publikationsliste

- B. Flöter, P. Juranić, S. Kapitzki, B. Keitel, K. Mann, E. Plönjes, B. Schäfer und K. Tiedtke: EUV Hartmann sensor for wavefront measurements at the free-electron laser in Hamburg. *New J. Phys.* **12**, 083015 (2010).
- B. Flöter, P. Juranić, P. Großmann, S. Kapitzki, B. Keitel, K. Mann, E. Plönjes, B. Schäfer und K. Tiedtke: Beam parameters of FLASH beamline BL1 from Hartmann wavefront measurements. *Nucl. Inst. and Meth. A* **635**, S. 108-112 (2011).
- B. Schäfer, B. Flöter, T. Mey, P. Juranic, S. Kapitzki, B. Keitel, E. Plönjes, K. Mann und K. Tiedtke: FEL beam characterization from measurements of the Wigner distribution function. *Nucl. Inst. and Meth. A* **654**, S. 502-507 (2011).
- J. Gaudin, B. Keitel, A. Jurgilaitis, R. Nüske, L. Guérin, J. Larsson, K. Mann, B. Schäfer, K. Tiedtke, A. Trapp, T. Tschentscher, F. Yang, M. Wulff, H. Sinn und B. Flöter: Time-resolved investigation of nanometer scale deformations induced by a high flux x-ray beam. *Opt. Expr.* **19**, 16, S. 15516-15524 (2011).

Danksagung

Herrn Prof. Dr. Tim Salditt danke ich für die Übernahme des Referats, die Betreuung der Arbeit und die fachliche Anbindung der Arbeit an das Institut für Röntgenphysik und den Sonderforschungsbereich 755. Ich danke Herrn Prof. Dr. Gerd Marowsky für die Übernahme des Korreferats, die Betreuung der Arbeit und die Möglichkeit, diese am Laser-Laboratorium Göttingen anzufertigen. Herrn Prof. Dr. Arnulf Quadt danke ich für die Betreuung der Arbeit und für Anregungen über das unmittelbare Thema der Dissertation hinaus.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Klaus Mann für vielfältige Anregungen und Diskussionen sowie die Möglichkeit, die Arbeit auf internationalen Konferenzen zu präsentieren. Herrn Dr. Bernd Schäfer danke ich für viele Diskussionen zur Strahlcharakterisierung und Wellenfrontsensorik, die wesentlich zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Allen Mitarbeitern des Laser-Laboratoriums und insbesondere der Arbeitsgruppe Optik / Kurze Wellenlängen danke ich für die freundliche Arbeitsatmosphäre.

Frau Dr. Barbara Keitel, Herrn Dr. Kai Tiedtke und Frau Dr. Elke Plönjes vom Deutschen Elektronen-Synchrotron gilt mein großer Dank für viele fruchtbare Diskussionen und die große Unterstützung bei der Planung und Durchführung der Experimente. Mein Dank gilt auch Frau Svea Kapitzki und Herrn Fini Jastrow für die Konstruktion vieler für die Experimente an FLASH und LCLS benötigter Teile und die Hilfe während der Strahlzeiten.

Herrn Jens-Oliver Dette und Herrn Maik Lübbecke danke ich besonders für die große Unterstützung bei der Konstruktion der Sensoren bzw. bei der Elektronik und Software für die Sensoren.

Herrn Dr. Jérôme Gaudin vom European XFEL danke ich für die gute und engagierte Zusammenarbeit beim Entwurf und bei der Auswertung des Photothermie-Experiments am ESRF.

Beim Deutschen Elektronen-Synchrotron möchte ich mich für die Finanzierung des Forschungsprojekts und die Bereitstellung der FLASH-Strahlzeit bedanken. Der DFG danke ich für die Unterstützung durch den Sonderforschungsbereich 755.

Mein weiterer Dank gilt

- Dr. Frank Barkusky für die Hilfe bei der Untersuchung vieler Proben mittels AFM und Interferometrie;
- Peter Großmann und Dr. Christian Peth für die Unterstützung an den EUV-Laborquellen;
- Andreas Spata für die Fertigung zahlreicher Teile;
- Dirk Born für die Hilfe rund um die IT-Infrastruktur des LLG;
- Dr. Laurent Guérin und Dr. Michael Wulff für die Unterstützung an der ESRF-Beamline ID09;
- Andrius Jurgilaitis, Dr. Ralf Nüske und Dr. Harald Sinn für ihre Hilfe bei den Messungen am ESRF;

- Dr. John Bozek und Dr. Christoph Bostedt für die Unterstützung an der LCLS AMO Station;
- Dr. Pavle Juranić für die Hilfe bei vielen Strahlzeiten an FLASH;
- und den vielen weiteren Mitarbeitern des Deutschen Elektronen-Synchrotrons, die während der FLASH-Strahlzeiten bei unzähligen kleineren Schwierigkeiten ausgeholfen haben.

Abschließend danke ich meinen Eltern und meinem Bruder für ihre stetige Unterstützung während des Studiums und der Promotionszeit.

Lebenslauf

Person

Name Bernhard Flöter
Geburtsdatum 26. Mai 1982
Geburtsort Darmstadt
Staatsangehörigkeit deutsch

Wissenschaftlicher Bildungsgang

10/2002–10/2004 Physikstudium
Technische Universität
Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig
10/2004–12/2006 Physikstudium
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg
12/2006 Diplom in Physik (Dipl.-Phys.)
Diplomarbeit: „D meson production in semi-inclusive
and hadron induced deep inelastic scattering“
04/2008–12/2011 Promotion
Georg-August-Universität Göttingen
und Laser-Laboratorium Göttingen

In den letzten Jahren haben mehrere Freie-Elektronen-Laser (FEL) im Röntgen-Spektralbereich den Nutzerbetrieb aufgenommen. Sie erzeugen 10–100 Femtosekunden lange Pulse mit hohem transversalen Kohärenzgrad und schmalbandigem Frequenzspektrum und erreichen gegenüber einfacher Undulatorstrahlung eine etwa zehn Größenordnungen höhere Spitzenbrillanz. Ein Hartmann-Wellenfrontsensor wurde für den EUV- und weichen Röntgen-Spektralbereich entwickelt, der bezogen auf die Wellenfrontauigkeit w_{rms} im Einzelpuls bei der Wellenlänge $\lambda=13\text{nm}$ die Wiederholgenauigkeit $\lambda/116$ erreicht und an den Freie-Elektronen-Lasern FLASH in Hamburg und LCLS in Stanford zur Wellenfrontmessung und Strahlcharakterisierung eingesetzt wurde. Es wurden typische, durch den SASE-Erzeugungsprozess der Strahlung bedingte Schwankungen des Strahldurchmessers, der Strahlage und der Intensität festgestellt. Die Strahlqualität der einzelnen Pulse ist hoch mit Beugungsmaßzahl nahe eins. Durch Kontrolle und Justage der optischen Elemente, insbesondere der fokussierenden Spiegel, wurden die Strahleigenschaften an den Beamlines optimiert. Vergleichende Strahlprofilmessungen mittels einer EUV-Kamera um die Strahltaile bestätigen die aus der Hartmann-Messung gewonnenen Strahlparameter. Eine Rekonstruktion der Wignerfunktion des Strahls liefert zusätzliche Informationen über den Kohärenzgrad.