

大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜设计与仿真^{*}邵尚坤 袁天语 李惠泉 孙学鹏 华 陆 刘志国 孙天希[†]

(北京师范大学射线束技术教育部重点实验室,核科学与技术学院,100875,北京;

北京市科学技术研究院辐射技术研究所,100875,北京)

摘要 针对同步辐射光源点到样品距离长的特点,设计了镀膜与非镀膜这2种大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜,并利用带有面型误差模型的仿真程序模拟了这2种大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的聚焦性能。结果表明:镀 Ir 膜的大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的入口直径、焦斑尺寸、焦深分别为 19.0 mm、7.1 μm 和 0.2 mm,接收立体角约为未镀膜聚焦镜的 3 倍;未镀膜聚焦镜的入口直径和焦斑尺寸分别为 15.0 mm 和 6.4 μm ,焦深为镀 Ir 膜聚焦镜的 4 倍。分析了大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的面型误差对其焦斑尺寸的影响,讨论了大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的应用前景。

关键词 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜;同步辐射 X 射线光源;面型误差

中图分类号 O434.1

DOI: 10.12202/j.0476-0301.2022065

0 引言

毛细管 X 射线聚焦镜是一种基于 X 射线全反射原理的反射型 X 射线调控器件,它包括单毛细管 X 射线聚焦镜、多毛细管 X 射线聚焦镜(PFXRL)和平行束透镜(PPXRL)(图 1)。

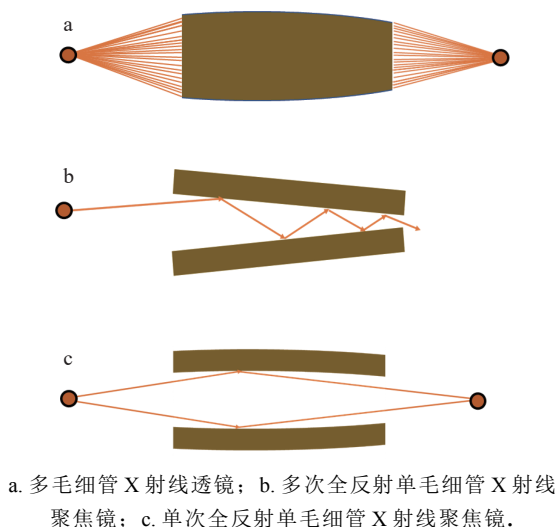


图 1 毛细管 X 射线聚焦镜示意

PFXRL 是由几万到几十万空心单毛细管纤维复合而成^[1]。单毛细管 X 射线聚焦镜分为多次和单次全反射,多次全反射单毛细管 X 射线聚焦镜的内壁通常被制作成圆锥面,X 射线在圆锥形单毛细管 X 射线聚

焦镜中通常要经过多次全反射,因此其具有传输效率低、工作距离短、发散度不可控、焦点位置随能量改变等缺点^[2-3];单次全反射单毛细管 X 射线聚焦镜的内表面通常被制作成椭球面或者抛物面,该聚焦镜具有传输效率高、工作距离长、发散度可控、焦点位置不随能量改变等优点^[4]。

自 Limburg 等^[5]首次提出单次全反射单毛细管 X 射线聚焦镜以来,其已被成功应用于基于实验室光源和同步辐射光源的各种 X 射线相关技术,如微 X 射线荧光分析、微 X 射线衍射^[6]、微 X 射线吸收精细结构分析^[7]、微小角 X 射线散射^[8]、三维共聚焦微 X 射线显微镜^[9]。单次全反射单毛细管 X 射线聚焦镜通常是直接用于实验室 X 射线光源的一次聚焦,或者用于同步辐射 X 射线光源的二次聚焦,其具有相对较小的入口焦距 L_i 。用于硬 X 射线调控的单次全反射单毛细管 X 射线聚焦镜的直径通常 $<3\text{ mm}$ 。

在同步辐射光源装置中,光源点到样品的距离通常 $>10\sim 100\text{ m}$ 。以上海同步辐射 X 射线成像线站为例,由于其光束是从插入件扭摆器引出,光源点到样品的距离为 34 m^[10-11]。大口径单次全反射单管 X 射线聚焦镜具有大的 X 射线接收面,因此在同步辐射 X 射线源上应用潜力巨大。已有研究发现,小口径单毛细管 X 射线聚焦镜的内壁镀膜存在镀膜不均匀、镀膜层薄的问题,使得镀膜后其传输效率等都低于理

^{*} 国家重点研发计划“基础科研条件与重大科学仪器设备研发”资助项目(2021YFF0701202);国家自然科学基金资助项目(11875087)

[†] 通信作者:孙天希(1969—),博士,研究员,博士生导师。研究方向:X 射线科学与技术。E-mail: stx@bnu.edu.cn

收稿日期:2022-03-29

论设计^[12]. 大口径单管 X 射线聚焦镜有利于镀膜过程前驱体进气, 因此可以改善小口径单毛细管 X 射线聚焦镜镀膜不均匀与镀膜层薄的问题.

1 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计

椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计, 根据其应用场景一般可分为 2 种: 1) 椭球型单管 X 射线聚焦镜的孔径 N_A 要与其后面光学器件进行匹配, 如全场 X 射线显微镜的椭球型单管 X 射线聚焦镜设计; 2) 为了 X 射线微束技术能提供一个高强度的微束, 其设计过程中考虑满足小焦斑、工作距离和实验平台空间等因素的同时, 尽可能使得焦斑尺寸内光强最大. 本文大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计是针对第 2 种应用场景, 目的是为获得一个高强度的微束(图 2).

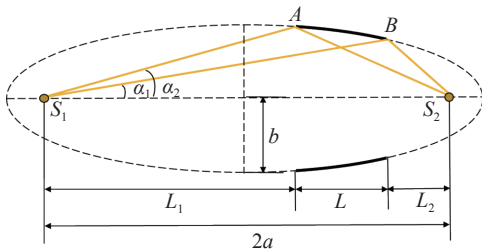


图 2 椭球型单管 X 射线聚焦镜光学设计原理

图 2 中, a 、 b 分别为椭球面的长半轴和短半轴长; 位于 S_1 处的光源发射出的 X 射线通过椭球面的反射被聚焦到焦点 S_2 处; 椭球型单管 X 射线聚焦镜的最大最小接收角分别为 $2\alpha_2$ 和 $2\alpha_1$, 因此椭球型单管 X 射线聚焦镜的接收立体角 $\Omega = 2\pi(\cos \alpha_1 - \cos \alpha_2)$, 椭球型单管 X 射线聚焦镜压缩比 $r_a = L_1/(L_1 + L_2)$, 其中 L_1 与 L_2 分别为椭球型单管 X 射线聚焦镜的前后焦距, L 为长度.

椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计, 通常是根据不同需求和应用选择不同的初始参数. 本研究选择的初始设计参数长半轴、入口直径和出口直径分别为 a 、 d_{in} 、 d_{out} . 为了快速找到最优设计方案, 我们设计了一个优化程序(图 3). 首先给 b 赋一个初始值, 当 B 点处反射角等于全反射临界角 θ_c 时, 可得到 Ω 最大的一组设计, 然后判断该方案是否符合设计要求, 如符合要求则记录符合要求的方案参数; 对于不符合设计要求的方案, 程序会进一步改变椭球面短半轴的值进行下一次的循环计算, 最后在多组符合设计要求的方案中找到接收立体角 Ω 最大的方案为最佳方案.

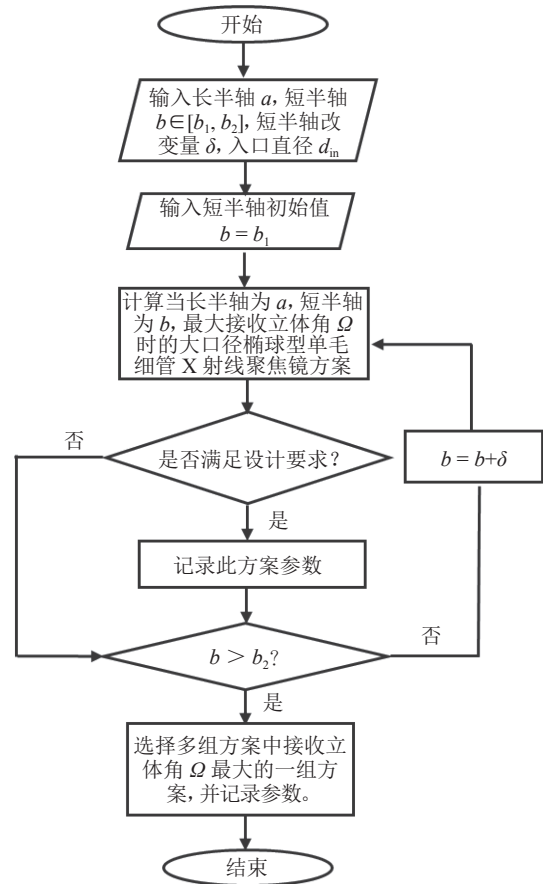


图 3 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计流程

2 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜仿真

当 X 射线入射到单管 X 射线聚焦镜内壁的角小于全反射临界角时, 入射到光滑表面的 X 射线可发生全反射效应, 由于 X 射线的折射系数 < 1 , 这使得只有满足从空气到光密介质才可能发生全反射效应. X 射线在单管 X 射线聚焦镜中的折射率为

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

式中: 实部 δ 与 X 射线的反射相关; 虚部 β 描述了 X 射线在介质中的吸收.

X 射线外全反射的临界角为

$$\theta_c = \sqrt{2\delta} \approx 0.02 \sqrt{\rho_M/E}, \quad (2)$$

式中: ρ_M 为光滑表面的体积质量; E 为入射 X 射线的能量. 根据反射界面处电场和磁场的连续条件, 反射率 R 与入射角 θ 的关系

$$R = \left(h - (\theta/\theta_c) \sqrt{2(h-1)} \right) / \left(h + (\theta/\theta_c) \sqrt{2(h-1)} \right) \quad (3)$$

能够被建立, 式中

$$h = (\theta/\theta_c)^2 + \left(\left((\theta/\theta_c)^2 - 1 \right)^2 + (\beta/\delta)^2 \right)^{1/2}. \quad (4)$$

由于聚焦镜的内壁不是完全光滑, 表面具有纳米级粗糙度, X 射线的反射必须考虑粗糙度的影响. 经沃勒-德拜公式校正后的反射率为

$$R_c = R \cdot \exp \left(- (4\pi\sigma \sin \theta)^2 / \lambda^2 \right), \quad (5)$$

式中 λ 、 σ 分别是入射 X 射线的波长、粗糙度的标准偏差, 单位均为 nm.

采用光线追迹的方法对椭球型单管 X 射线聚焦镜进行仿真模拟, 面型误差主要是由椭球型单管 X 射线聚焦镜的中心线和截面直径扰动所带来的. 为了简化椭球面单管 X 射线聚焦镜的数学模型, 在仿真模拟中, 只引入中心线和截面直径扰动作为椭球面单管 X 射线聚焦镜的面型误差. 设光源点位于 $-a$, 中心线在 x 轴方向的扰动为 $c_x(y)$, 在 z 轴方向的扰动为 $c_z(y)$, 因此沿 y 轴的椭球型单管 X 射线聚焦镜的中心线扰动为 $C(y) = c_x(y) \cdot x + c_z(y) \cdot z$. 同理, 截面直径扰动可以表示为 $S(y) = s_x(y) \cdot x + s_z(y) \cdot z$, 那么引入面型误差的椭球型单管 X 射线聚焦镜的内壁方程为^[13-14]

$$\frac{(x - c_x(y))^2}{(b + s_x(y))^2} + \frac{(y)^2}{a^2} + \frac{(z - c_z(y))^2}{(b + s_z(y))^2} = 1, \quad (6)$$

式中 a 、 b 分别是长半轴和短半轴长.

3 结果与讨论

大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计和仿真同步辐射光源参数分别为: 能量分辨 1.6×10^{-3} ; 能量范围 5~20 keV; 光源到样品的距离 34 m; 光源后端未加

任何聚焦光学器件, 因此椭球面的 $a = 17$ m. 考虑到拉丝塔加热炉的尺寸、镀膜工艺、拉制难易程度, 以及椭球型单管 X 射线聚焦镜实用性等因素, 设定大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的长度 < 300 mm, 镀膜压缩比 > 45 , 非镀膜压缩比 > 20 . 为了便于微区 X 射线分析, 设计要求大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜焦斑 $< 10 \mu\text{m}$ (表 1).

表 1 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的设计参数

设计参数	E-1	E-2
相关物理参数/mm		
a	17 000.0	17 000.0
b	32.6	18.2
L	281.8	298.1
L_1	33 262.2	32 489.5
L_2	456.0	1 212.4
d_{in}	19.0	15.0
d_{out}	15.0	13.5
接收立体角 /sr	$1.24 \times 10^{-7} \pi$	$4.26 \times 10^{-8} \pi$
截止能量 /keV	10	10
镀膜材料	Ir	—

注: E-1 是镀了金属 Ir 膜, 其接收立体角约为未镀膜 E-2 的 3 倍, 这是由于镀 Ir 膜后会提高 X 射线全反射的临界角.

大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1 在 5~10 keV 时, 其仿真传输效率为 $(82.80 \pm 2.7)\%$, 未镀膜 E-2 为 $(97.44 \pm 0.22)\%$, 镀膜聚焦镜 E-1 具有相对较小的传输效率, 这是由于金属 Ir 对于 X 射线的吸收大于高硼玻璃 (图 4).

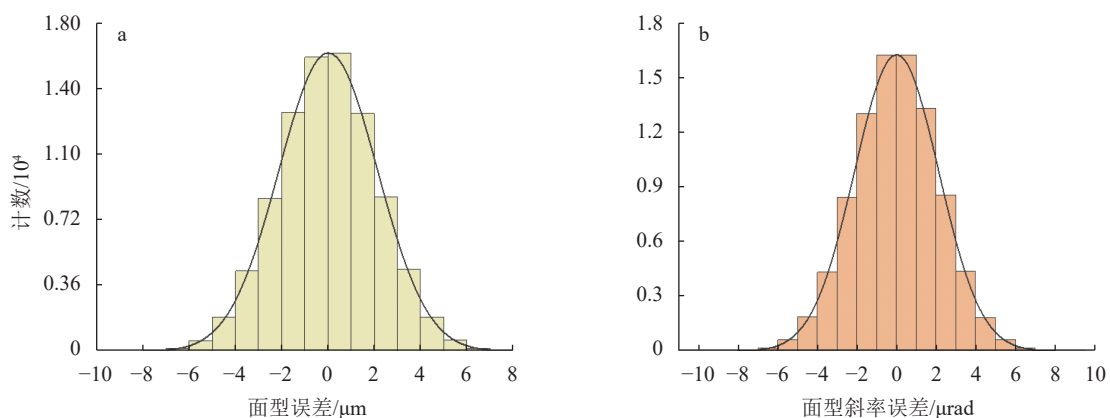
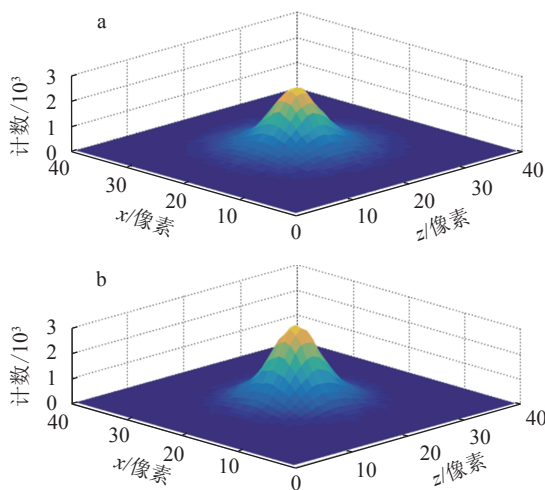


图 4 仿真模拟面型误差和面型斜率误差的直方

经高斯函数拟合, 得到的面型误差和面型斜率误差的 FWHM 分别为 $5 \mu\text{m}$ (图 4-a) 和 $5 \mu\text{rad}$ (图 4-b). 理想情况下, S_1 处发射的 X 射线经过大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的反射, 在 S_2 处形成一个焦点. 实

际上大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的面型误差会导致焦点 S_2 处形成一个弥散的光斑. 由于椭球型单管 X 射线聚焦镜是一种基于单次全反射的成像聚焦器件, 焦斑尺寸通常不随能量而改变, 因此在模拟焦

斑性质时只需要设置某一特定能量模拟即可(图 5)。



a. E-1 的焦斑光强的分布; b. E-2 的焦斑光强的分布。

图 5 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜焦斑光强的分布
(入射 X 射线能量为 10 keV)

图 5 中, 镀膜的大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1 的仿真焦斑大小为 $7.1\ \mu\text{m}$, 未镀膜的 E-2 为 $6.4\ \mu\text{m}$, 均满足焦斑大小 $<10.0\ \mu\text{m}$ 设计要求。具有较大压缩比的镀膜的大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1 的仿真焦斑反而要比未镀膜 E-2 略大, 这是由于聚焦镜 E-1 的较大口径和发散度使焦斑弥散效应增加, 因此椭球型单管 X 射线聚焦镜设计需要考虑压缩比、发散度和面型误差等参数对焦斑尺寸的综合影响(图 6)。

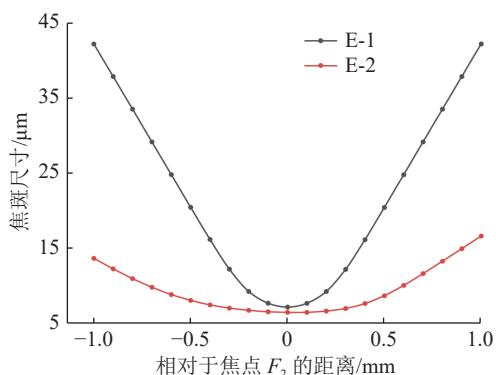


图 6 入射 X 射线能量为 10 keV 时不同位置处仿真焦斑尺寸的变化

图 6 中, 大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1 由于具有较大的发散度, 使得焦斑的尺寸随着距离的增加先快速聚焦到最小焦斑, 然后又快速散焦, 其焦深约为 $0.2\ \text{mm}$; 未镀膜的聚焦镜 E-2 随着距离的增加聚焦与散焦都较慢, 其焦深约为 $0.8\ \text{mm}$ 。具有更大接收立体角大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1, 可用于快速微区 X 射线分析技术, 但较小的焦深限制了其应

用范围, 尤其是需要大“深宽比”的微区 X 射线分析技术; 聚焦镜 E-2 虽适用于较大“深宽比”的微区分析, 但相比于聚焦镜 E-1 具有较小的接收立体角, 因此椭球型单管 X 射线聚焦镜设计需要根据应用需求综合考虑各参数之间的相互影响。

4 结语

针对同步辐射光源点到样品的距离长的特点, 本文设计了镀膜与非镀膜 2 种大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜, 并使用带有面型误差模型的仿真程序模拟了 2 种大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的聚焦性能。镀膜的大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜的入口直径为 $19.0\ \text{mm}$, 焦斑尺寸为 $7.1\ \mu\text{m}$, 焦深为 $0.2\ \text{mm}$, 接收立体角为未镀膜聚焦镜的 3 倍; 未镀膜聚焦镜的入口直径为 $15.0\ \text{mm}$, 焦斑尺寸为 $6.4\ \mu\text{m}$, 焦深为 $0.8\ \text{mm}$ 。更大接收立体角大口径椭球型单管 X 射线聚焦镜 E-1, 可用于快速微区 X 射线分析技术, 但较小的焦深限制了对于较厚样品的微区分析。聚焦镜 E-2 虽适用于较厚样品的微区分析, 但具有较小的接收立体角。

5 参考文献

- [1] MACDONALD C A. Focusing polycapillary optics and their applications[J]. X-ray Optics and Instrumentation, 2010, 2010: 17
- [2] STERN E A, KALMAN Z, LEWIS A, et al. Simple method for focusing X rays using tapered capillaries[J]. Applied Optics, 1988, 27(24): 5135
- [3] KUCZUMOW A, LARSSON S. Scheme for X-ray tracing in capillary optics[J]. Applied Optics, 1994, 33(34): 7928
- [4] HUANG R, BILDERBACK D H. Single-bounce monocapillaries for focusing synchrotron radiation: modeling, measurements and theoretical limits[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2006, 13(1): 74
- [5] LIMBURG K E, HUANG R, BILDERBACK D H. Fish otolith trace element maps: new approaches with synchrotron microbeam X-ray fluorescence[J]. X-Ray Spectrometry, 2007, 36(5): 336
- [6] SIRENKO A A, KAZIMIROV A, CORNABY S, et al. Microbeam high angular resolution X-ray diffraction in InGa N/GaN selective-area-grown ridge structures[J]. Applied Physics Letters, 2006, 89(18): 181926
- [7] BARREA R A, HUANG R, CORNABY S, et al. High-flux hard X-ray microbeam using a single-bounce capillary with doubly focused undulator beam[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2009, 16(1): 76
- [8] LAMB J S, BILDERBACK D H, POLLACK L, et al. Focusing capillary optics for use in solution small-angle X-

- ray scattering[J]. Journal of Applied Crystallography, 2007, 40(1): 193
- [9] WOLL A R, MASS J, BISULCA C, et al. Development of confocal X-ray fluorescence (XRF) microscopy at the Cornell high energy synchrotron source[J]. Applied Physics A, 2006, 83: 235
- [10] FENG B G, DENG B, REN Y Q, et al. Full-field X ray nano-imaging system designed and constructed at SSRF[J]. Chinese Optics Letters, 2016, 9: 84
- [11] 陶芬, 王玉丹, 任玉琦, 等. X射线纳米成像单毛细管椭球镜的设计与检测[J]. 光学学报, 2017, 37(10): 375
- [12] WANG Y B, LI Y L, SHAO S K, et al. Enhancement of properties of high-density material coated glass monocapillary X-ray condenser based on atomic layer deposition[J]. Optics Communications, 2020, 464: 125544
- [13] SHAO S K, LI H Q, TAO F, et al. A passive characterization method of the single-bounce ellipsoidal capillary for the full field transmission X-ray microscopy[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2021, 1014: 165735
- [14] ZHANG S, PAN K, WANG Z, et al. Simulation of optical properties of ellipsoidal monocapillary X-ray optics with inner-surface imperfections[J]. Optics Communications, 2021, 493: 127028

Design and simulation of large-diameter ellipsoidal single-bounce capillary lens

SHAO Shangkun YUAN Tianyu LI Huiquan SUN Xuepeng
HUA Lu LIU Zhiguo SUN Tianxi

(The Key Laboratory of Beam Technology of the Ministry of Education, College of Nuclear Science and Technology,
Beijing Normal University, 100875, Beijing, China;
Institute of Radiation Technology, Beijing Academy of Science and Technology, 100875, Beijing, China)

Abstract Two large-diameter single-bounce ellipsoidal capillary lens were designed for synchrotron radiation source, one was coated and the other was not. Performance was simulated with a surface error model. Entrance diameter of Ir-coated capillary was 19.0 mm, focal spot size was 7.1 μm , focal depth was 0.2 mm; receiving solid angle was 3-fold of uncoated one. Entrance diameter of uncoated capillary was 15.0 mm, focal spot size was 6.4 μm ; focal depth was 4-fold of Ir-coated one. The relationship between surface error and focal spot size was studied. The application of large-diameter single-bounce ellipsoidal capillary in related X-ray technology was discussed.

Keywords large-diameter single-bounce ellipsoidal capillary; synchrotron radiation X-ray source; surface error

【责任编辑: 陆有忠】