

椭球单毛细管高能 X 射线微焦斑透镜模拟表征^{*}

李惠泉 邵尚坤 孙学鹏 袁天语 华 陆 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 为了使单毛细管透镜在 X 射线微区分析中获得高能 X 射线微焦斑,设计并模拟了基于椭球单毛细管的高能 X 射线微焦斑透镜,并模拟透镜内表面镀金属氧化膜,氧化膜主要成分为 HfO_2 . 结果表明:镀膜透镜和普通玻璃透镜都可以将能量为 100 keV 的 X 射线会聚成 $<10.0 \mu\text{m}$ 的焦斑;与普通玻璃透镜相比,透镜镀膜后 X 射线聚焦能量上限提高了约 2 倍. 为增加镀膜透镜光通量,重新设计了镀膜透镜,该新透镜相比于最初设计的普通玻璃透镜,在相同的实验室光源条件下聚焦能量为 100 keV 的 X 射线,在焦斑处光通量提高了 3.8 倍,功率密度增益提高了 1 个数量级,这表明透镜镀膜对聚焦高能 X 射线有一定的应用价值. 模拟结果对椭球单毛细管高能 X 射线透镜的研制和应用具有指导意义.

关键词 椭球单毛细管 X 射线透镜;镀膜;高能 X 射线;微焦斑;设计

中图分类号 O434.1

DOI: 10.12202/j.0476-0301.2022103

0 引言

随着 X 射线微区分析的发展,高能 X 射线微焦斑在 X 射线微区分析技术中扮演着越来越重要的角色,因此,如何利用 X 射线光学器件获得高能 X 射线微焦斑备受关注. 现阶段有多种 X 射线光学器件可以实现会聚高能 X 射线^[1-11],其中,基于 X 射线折射效应的 X 射线复合折射透镜便于获得高能 X 射线微焦斑,但该类透镜的研制过程往往需要精密机械加工. 基于上述考虑,本文将采用毛细管 X 射线透镜技术中的椭球单毛细管 X 射线透镜技术来获得高能 X 射线微焦斑. 椭球单毛细管 X 射线透镜是基于外全反射原理的光学器件^[12-14]. X 射线在介质外表面发生全反射时对应的全反射临界角满足

$$\theta_c = 20.3 \sqrt{\rho}/E, \quad (1)$$

式中: θ_c 单位为 mrad ; E 为 X 射线能量,单位为 keV ; ρ 为介质密度,单位为 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$. 在毛细管 X 射线透镜应用于微区 X 射线分析中,微区分析的空间分辨率取决于其焦斑大小,所以透镜焦斑大小成为微区分析的重要参数. 如何获得一个高功率密度增益的微焦斑,对毛细管 X 射线透镜的应用至关重要. 毛细管 X 射线透镜分为单毛细管透镜和多毛细管整体透镜. 研究表明,

由于多毛细管会聚透镜内部高占空比的结构特点^[12],当多毛细管 X 射线透镜焦斑直径 $\approx 30 \mu\text{m}$ 时,会聚能量 20 keV 的 X 射线能产生预期的聚焦效果;但随着 X 射线能量的提升,在焦斑处会出现 Halo 效应^[15],从而影响透镜的焦斑尺寸,不利于小焦斑的形成,且多毛细管透镜产生的 Halo 效应难以利用 beam stop 消除(图 1).

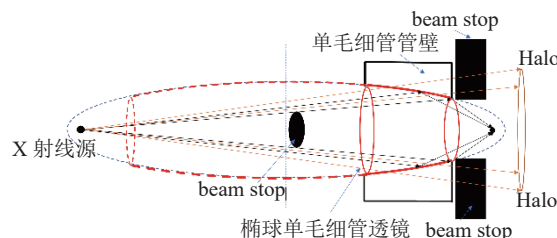


图 1 X 射线穿透椭球单毛细管透镜示意

采用单毛细管 X 透镜可以克服多毛细管透镜在会聚高能 X 射线获得微焦斑时的困难. 以玻璃单毛细管透镜为例,当 X 射线不满足全反射临界角穿过玻璃壁时,其衰减规律服从指数衰减,即

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu d}, \quad (2)$$

式中: I_0 、 I 分别为初始和衰减后的 X 射线强度,单位为 s^{-1} ; μ 为物质衰减系数,单位为 cm^{-1} ; d 为衰减距离,

^{*} 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);北京师范大学学科交叉基金资助项目(BNUXKJC2121)

[†] 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: 2022-04-25

单位为 cm. 大多数 X 射线会被玻璃壁吸收, 但是在透镜出口端由于缺少足够厚度的玻璃壁, 依然容易产生影响焦斑尺寸的 Halo 效应. 在实验过程中, 在椭球单毛细管透镜出口处添加 beam stop, 即可消除透镜出口处 X 射线穿透玻璃壁对焦斑产生的影响. beam stop 可以使用铅板, 对于 100 keV 的 X 射线, Pb 的 $\mu = 62.7 \text{ cm}^{-1}$, 由式(2)计算可知, 使用厚度 $> 1.2 \text{ mm}$ 的铅板即可阻挡 99.9% 的 X 射线.

1 透镜模拟理论基础

如图 2 所示, 椭球单毛细管 X 射线透镜(EMCXRL)的内壁方程为

$$\begin{cases} \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1, \\ D - c \leq z \leq D - c + L_c, \end{cases} \quad (3)$$

式中: a 、 b 分别为椭圆短轴和长轴长度; c 为椭圆的长焦距; D 为光源到透镜入口的距离; L_c 为透镜长度.

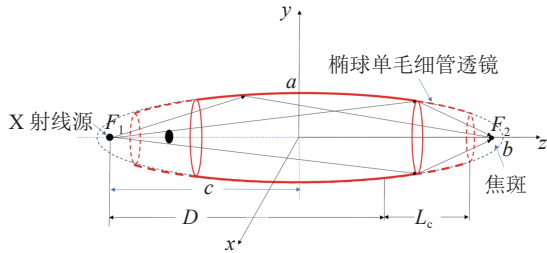


图 2 椭球单毛细管 X 射线透镜示意

模拟光线在透镜内传输是基于光线追迹原理, 在球面波光源的光源平面内随机取一点 (x_s, y_s, z_s) 作为入射光线上的一点, 并在透镜入口平面内随机取一点 (x_p, y_p, z_p) , 可得入射光线方向矢量

$$\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z) = \frac{1}{d_0} (x_p - x_s, y_p - y_s, z_p - z_s), \quad (4)$$

式中 $d_0 = \sqrt{(x_p - x_s)^2 + (y_p - y_s)^2 + (z_p - z_s)^2}$.

由式(3)可得外法线矢量

$$\mathbf{n} = \left(\frac{m_x}{\sqrt{(m_x + m_y + m_z)^2}}, \frac{m_y}{\sqrt{(m_x + m_y + m_z)^2}}, \frac{m_z}{\sqrt{(m_x + m_y + m_z)^2}} \right), \quad (5)$$

式中: $m_x = \frac{2x}{a^2}$; $m_y = \frac{2y}{a^2}$; $m_z = \frac{2z}{b^2}$.

入射光线与管壁的夹角为

$$\theta = \sin^{-1}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}). \quad (6)$$

反射光的方向矢量

$$\mathbf{r} = \mathbf{u} + 2\mathbf{n} \sin \theta. \quad (7)$$

1 次反射完成后, 再将反射矢量($\mathbf{r}$)设定为新的入射矢量($\mathbf{u}$); 将交点坐标作为新的入射光起点坐标, 以此循环迭代, 形成在管壁内发生 1 次或多次全反射, 实现追踪任意光线的传输路径.

传输效率

$$\eta = I_{\text{out}} / I_{\text{in}}, \quad (8)$$

式中 I_{out} 、 I_{in} 分别为透镜入口和出口处的 X 射线强度, 单位为 s^{-1} .

单毛细管 X 射线透镜焦斑处的功率密度增益

$$G = I_{\text{with}} / I_{\text{without}}, \quad (9)$$

式中 I_{with} 、 I_{without} 分别为有透镜和无透镜时处于同一位置的 X 射线强度, 单位为 s^{-1} .

2 椭球单毛细管 X 射线透镜模拟结果与分析

本研究利用蒙特卡罗方法模拟 X 射线随机入射到透镜内部, 应用 Matlab 软件进行计算模拟. 为方便计算, 将 X 射线归一化, 即当其入射至荧光屏时, 荧光屏对应位置的光子计数加 1; 光子数量可反映 X 射线的强弱. 为获得透镜内壁全反射的传输情况, 编程时直接过滤掉直通光, 只保留其数值结果, 并将传输过程可视化.

鉴于椭球单毛细管透镜有良好的聚焦特性, 研究采用具有小口径椭球单毛细管实现对高能 X 射线的微焦斑会聚. 小口径单毛细管透镜的缺点是光通量低, 为了在焦斑处得到更高的光通量, 理论上透镜长度越大, 反射光越多, 焦斑处光通量越大. 所以, 设计时应尽量增大小口径透镜的入口直径, 增加透镜的长度, 从而提高光通量. 由于椭球管的性质, 设计时只考虑 X 射线在玻璃管内壁发生一次全反射. 本文需要获得微焦斑, 由于图 2 中椭球前半段对焦斑有放大作用, 后半段对焦斑有缩小作用, 所以设计时只采用椭球后半段(图 2 椭球右边的实线部分)^[16]. 基于上述考虑, 将椭球模型后半段任意 X 射线能满足全反射条件的最大有效长度定义为有效管长 L_{ef} , 设计椭球单毛细管透镜时, 通常将 L_{ef} 设定为透镜长度 L_c . 考虑可接受合理的工作距离, 通过理论计算, 设计透镜参数如下: 透镜长度、椭球长半轴分别为 70.0、100.0 mm; 入口直径、出口直径、椭球短半轴分别为 50.0、35.7、25.0 μm .

如图 3 所示, 将三维传输情况投影到二维平面内, 利用色温将光强差可视化, 其中水平方向为 X 射线水平传输方向, 竖直方向为透镜入口内径.

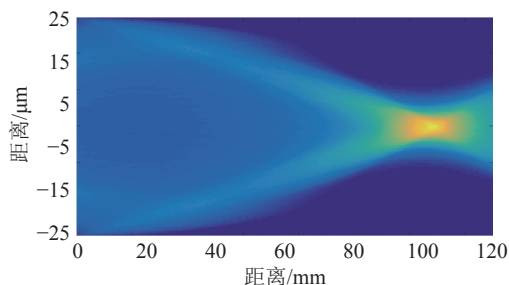


图 3 10^6 根 X 射线入射到椭球管内壁获得的传输平面投影

模拟条件: 光源放置在椭球的左焦点处, 光源的焦斑直径为 $20.0\ \mu\text{m}$, X 射线能量为 $100\ \text{keV}$.

如图 4 所示, 在透镜内壁附近反射的 X 光形成的

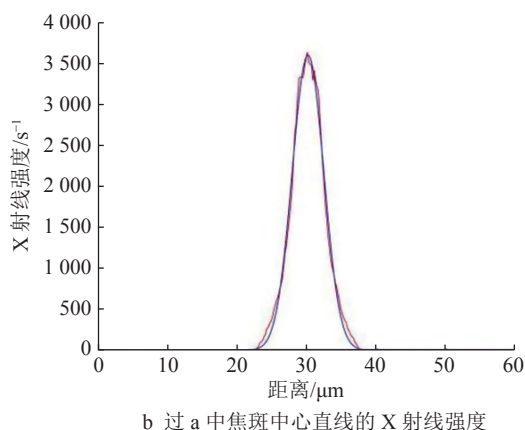
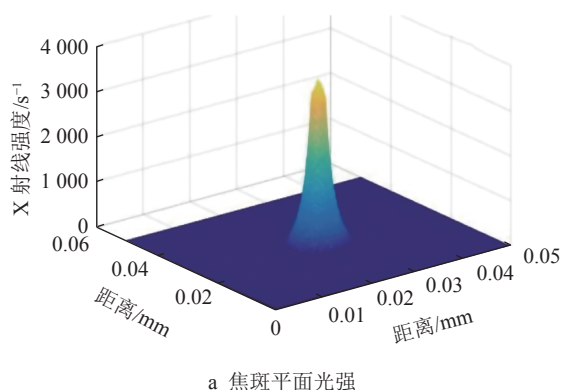


图 4 焦斑光强分布

随着镀膜技术的发展^[17-20], 在毛细管内表面镀金属氧化膜成为提升透镜聚焦能力的重要手段之一. 为提升透镜性能, 基于现有的镀膜技术, 模拟在透镜内表面镀金属氧化膜, 提高透镜的聚焦能力. 金属氧化膜成分为 HfO_2 , 密度为 $9.68\ \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 根据式(1)可知, 镀膜后透镜对于同一能量的 X 射线的全反射临界

角大约增加了 2.1 倍. 通过比较镀膜透镜和普通玻璃透镜在高能能量段的参数变化, 研究镀膜对透镜性能的影响.

对已经设计好的透镜镀膜, 并模拟镀膜透镜和普通玻璃透镜在 $100\sim 300\ \text{keV}$ 能量段的传输效率和焦斑大小变化(图 5).

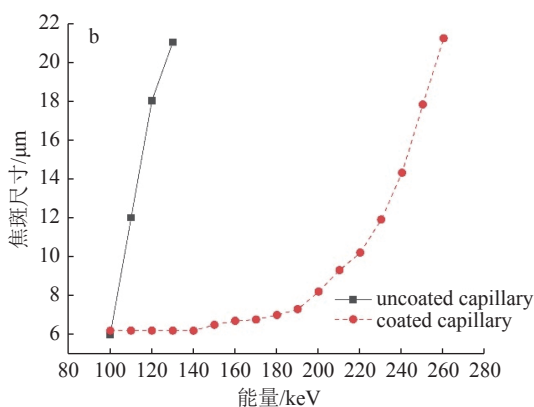
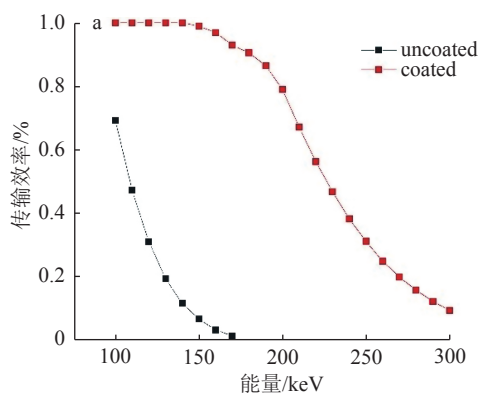


图 5 传输效率和焦斑大小随能量变化曲线

由图 5 可知, 普通玻璃透镜在该设计长度下, 可以传输最大能量为 $150\ \text{keV}$ 的 X 射线, 但此时的传输效

率约为 6%; 当 X 射线能量 $> 120\ \text{keV}$ 时, 玻璃透镜聚焦获得的焦斑 $> 20.0\ \mu\text{m}$, 且焦距逐渐变大, 不再处于

椭球管理想的焦距位置,说明X射线能量大于120 keV时,该透镜失去聚焦作用。而镀膜透镜提高了聚焦能量上限,在X射线为200 keV时,可将20.0 μm 尺寸的光源聚焦成8.4 μm 的焦斑,且传输效率较高;当X射线能量>250 keV时,焦斑>20.0 μm ,焦距偏离椭球焦距位置,镀膜透镜失去聚焦作用。由此可知,镀膜后的透镜聚焦能量上限大约提升了2倍。

镀膜透镜可将200 keV的X射线实现聚焦成微米级焦斑,考虑到影响实验的重要因素是光通量,故此设计的透镜入口直径为50.0 μm 。将小口径单毛细管应用于实验室光源而言,其功率有限,小口径聚焦获得的焦斑处的光通量相应较小,一般设计透镜时,选择入口光通量更大的透镜弥补该缺点,且在镀膜过程中,透镜口径更大有利于降低镀膜工艺水平。镀膜透镜聚焦能量是100 keV的X射线时,理论计算入射角约为全反射临界角的一半,所以考虑重新设计镀膜透镜,即增加短半轴 a 的值,入口半径相应增大,透镜可以接收到更大角度的X射线,有利于提高光通量。经理论计算,取 $a=50.0 \mu\text{m}$ 。为找到最适合的 L_c ,保持镀膜透镜的 a 和 b 的值不变,即短半轴 $a=50.0 \mu\text{m}$,长半轴 $b=100.0 \text{ mm}$,改变 L_c ,X射线能量为100 keV,光源不变(如图6)

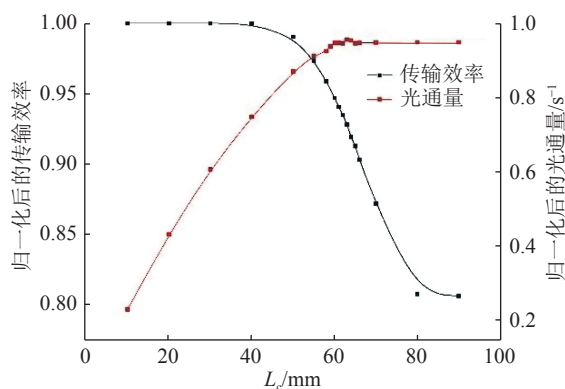


图6 传输效率和光通量随管长变化曲线

由图6可知, $L_c>64.0 \text{ mm}$ 时,光通量不再增加,可得 $L_{\text{ef}}=64.0 \text{ mm}$ 。理论上透镜长度取64.0 mm时可以获得最大的光通量,但考虑传输效率在 $L_c>50.0 \text{ mm}$ 时下降较快,说明大部分X光在 $L_c>50.0 \text{ mm}$ 的透镜内表面上不满足全反射条件,结合二者参数,取 $L_c=55.0 \text{ mm}$ 。重新设计的镀膜透镜参数如下:透镜长度、椭球长半轴分别为55.0、100.0 mm;入口直径、出口直径、椭球短半轴分别为100.0、83.5、50.0 μm 。模拟测得透镜在此条件下聚焦得到的焦斑大小约为8.5 μm ,传输效率为97.3%, $G=135.0$ 。与不镀膜透镜相比,重新设计后的镀膜透镜聚焦100 keV的X射线获得的

焦斑大小略小于未镀膜透镜,模拟得到焦斑处的光通量为未镀膜透镜的4.8倍, G 比未镀膜透镜高1个数量级,可见镀膜对提升透镜性能具有积极意义。

本模拟结果是基于透镜表面为理想光滑表面,即面型误差为0,模拟大量入射光在透镜内传输,获得较为理想的透镜参数。而在实际透镜拉制过程中,由于椭球管表面曲率小,在拉制时很容易产生面型误差,导致焦斑变大,传输效率变小, G 相应变小。高能X射线适合利用小口径透镜聚焦,但小口径导致的低光通量使得透镜不便在实验室光源条件下使用,且面型误差对小口径透镜的影响更大,若在模拟过程中加入面型误差,结合镀膜条件,会使模拟结果更接近真实值。

3 结语

为了获得高能微焦斑,本文模拟并表征具有小口径的椭球单毛细管透镜聚焦高能X射线,为提升透镜聚焦性能,模拟在透镜内表面镀成分为 HfO_2 的金属氧化膜,并与普通玻璃透镜参数对比。结果表明,透镜镀膜后聚焦能量上限约提升了2倍。为提高透镜焦斑处的光通量,重新设计了透镜,增大了透镜入口直径并将透镜镀膜,新的镀膜透镜焦斑处的光通量比最初设计的普通玻璃透镜约提升了3.8倍,且 G 相比于普通玻璃透镜提升了1个数量级。通过模拟和表征椭球单毛细管透镜参数,对透镜应用于高能X射线微区分析有潜在价值和应用。

4 参考文献

- [1] 王占山,黄秋实,张众,等. 极紫外、X射线和中子薄膜光学元件与系统[J]. 光学学报,2021,41(1): 451
- [2] 高雅增,吴鹿杰,卢维尔,等. 基于严格耦合波理论的硬X射线菲涅耳波带片设计[J]. 光学学报,2021,41(11): 86
- [3] HUANG Q S, KOZHEVNIKOV I V, SOKOLOV A, et al. Theoretical analysis and optimization of highly efficient multilayer-coated blazed gratings with high fix-focus constant for the tender X-ray region[J]. Optics Express, 2020, 28(2): 821
- [4] 韩业明,付跃刚,欧阳名钊,等. 子午型龙虾眼透镜X射线聚焦特性的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2021, 58(6): 428
- [5] KOHN V, SNIGIREVA I, SNIGIREV A. Diffraction theory of imaging with X-ray compound refractive lens[J]. Optics Communications, 2003, 216(4/5/6): 247
- [6] LENGELER B, SCHROER C G, RICHWIN M, et al. A microscope for hard X rays based on parabolic compound refractive lenses[J]. Applied Physics Letters, 1999, 74(26):

- 3924
- [7] 骆钧尧, 郭智, 黄浩, 等. 多层膜光栅衍射效率的同步辐射研究[J]. 光学学报, 2021, 41(14): 9
- [8] HUANG Q S, MEDEVDEV V, VAN DE KRUIJS R, et al. Spectral tailoring of nanoscale EUV and soft X-ray multilayer optics[J]. Applied Physics Reviews, 2017, 4(1): 011104
- [9] WANG Z S, LIAO Y Y, SHEN Z X, et al. Development of imaging x-ray telescopes at Tongji University [J]. Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, Systems, 2019, 5(4): 044010
- [10] KAZUTO Y, HIDEKAZU M, TAKASHI K, et al. Single-nanometer focusing of hard X-rays by Kirkpatrick-Baez mirrors[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2011, 23(39): 4206
- [11] SUN T X, DING X L. Determination of the properties of a polycapillary X-ray lens[J]. X-Ray Spectrometry, 2006, 35(2): 120
- [12] KUMAKHOV K M, KOMAROV F F. Multiple reflection from surface X-ray optics[J]. Physics Reports, 1990, 191(5): 289
- [13] 孙天希, 刘志国, 丁训良. 毛细管X射线光学器件的性能及应用 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 2009: 23-106
- [14] SUN T X, DING X L. Confocal X-ray technology based on capillary X-ray optics[J]. Reviews in Analytical Chemistry, 2015, 34(1/2): 45
- [15] SUN T X, DING X L. Measurements of energy dependence of properties of polycapillary X-ray lens by using organic glass as a scatterer[J]. Journal of Applied Physics, 2005, 97(12): 67
- [16] 王亚冰, 朱玉, 孙天希, 等. 基于单次全反射椭圆单玻璃管X射线聚焦镜表征光源参数[J]. 光学精密工程, 2017, 25(11): 2872
- [17] 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
- [18] NAKASAWA T, NAKANO K, YOSHIDA M, et al. Enhancement of XRF intensity by using Au-coated glass moncapillary[J]. Powder Diffraction, 2011, 26(2): 163
- [19] HIRSCH G. Metal capillary optics: novel fabrication methods and characterization[J]. X-ray Spectrometry, 2003, 32(3): 229
- [20] MATSUURA Y, GANNOT I, OYAMA T, et al. Metal-coated capillary optics for soft X-ray[J]. Proceedings of SPIE: the International Society for Optical Engineering, 2005, 5691: 9

Simulation and characterization of ellipsoidal moncapillary X-ray lens with a micro focal spot for high energy X-ray

LI Huiquan SHAO Shangkun SUN Xuepeng YUAN Tianyu
HUA Lu 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 To obtain high-energy X-ray micro-focal size for moncapillary X-ray lens in X-ray micro-area analysis, a high-energy X-ray micro-focal spot lens based on ellipsoidal moncapillary was designed and simulated. The inner surface of lens coated with metal oxide film was simulated, the composition of which was HfO_2 . Simulations showed that both coated and ordinary glass lens could focus X-rays at 100 keV into a focal size below 10 microns. Compared with ordinary glass lenses, the upper limit of X-ray focusing energy was increased 2-fold after coating the lens. To improve input flux, the coated lens was redesigned. Compared with glass lens, newly coated lens showed a 3.8-fold increase in luminous flux at the focal size at 100 keV, the power density gain increased by an order of magnitude, indicating that lens coating was valuable to focus high-energy X-rays. It is concluded that simulations could guide fabrication and application of ellipsoidal moncapillary high-energy X-ray lenses.

Keywords ellipsoidal moncapillary X-ray lens; coating; X-rays with high energy; micro focal spot; design

【责任编辑: 陆有忠】