

文章编号: 0253-2239(2010)01-0310-05

圆锥形 X 光导管的传输特性研究

李玉德^{1,2} 林晓燕^{1,2} 潘秋丽^{1,2} 谈国太^{1,2}

(¹ 北京师范大学核科学与技术学院 射线束技术与材料改性教育部重点实验室, 北京 100875)

² 北京市辐射中心, 北京 100875

摘要 利用光线追迹原理建立的圆锥形 X 光导管的计算模型, 对圆锥形 X 光导管传输特性进行了系统的理论研究。通过对 X 射线经过锥管的光强分布计算, 得到光源尺寸和锥管入口直径共同影响光强分布形式的结论。计算了锥管功率密度增益 K 随距离锥管出口不同位置 f_2 的变化规律。研究了功率密度增益随光源尺寸的变化规律。最后以等效距离为标准讨论了锥管的优化设计。

关键词 X 射线光学; 光强分布; 功率密度增益; 等效距离; 圆锥形 X 光导管

中图分类号 O434.1 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20103001.0310

Study on the Transmission Characteristics of a Tapered X-Ray Capillary

Li Yude^{1,2} Lin Xiaoyan^{1,2} Pan Qiuli^{1,2} Tan Guotai^{1,2}

(¹ Key Laboratory of Beam Technology and Material Modification, Ministry of Education, College of Nuclear Science and Technology, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

² Beijing Radiation Center, Beijing 100875, China

Abstract Based on the ray-tracing theory, a calculation model for X-ray transmission in a tapered X-ray capillary was set up. Using the calculation model, systematic theoretical studies on the transmission characteristics of a tapered capillary were performed. Calculating the intensity distribution, the conclusion was got that the size of X-ray source and the entrance diameter of the tapered capillary affected the form of intensity distribution. We got the change rules of power density gain K with R_0 and f_2 . Taking the equivalent distance L_{eq} as a standard, the optimal design of tapered capillary was discussed.

Key words X-ray optics; intensity distribution; power density gain; equivalent distance; tapered X-ray capillary

1 引言

近些年以导管 X 射线光学为基础的毛细管光学元件在现代科技领域继续发挥着重要的作用^[1~6]。导管 X 射线光学主要研究 X 射线在单导管或多导管中传输时, 随导管材料、导管几何参量、导管入口端到 X 光源距离、导管出口端到实验样品距离、X 光源形状和几何尺寸、X 射线能量等参量变化的机制和规律。

X 光单导管有圆柱形直导管、圆柱形弯导管、圆锥形直导管、旋转椭球管、旋转抛物物体管等几种形式。圆柱形和圆锥形单毛细管元件聚焦的光斑尺寸可以小到微米量级, 这是多毛细管元件无法比拟的

优点, 所以单毛细管元件在同步辐射以及常规实验室的微束 X 射线荧光分析和微束 X 射线衍射分析研究领域得到了很好的应用^[7~14]。像美国 NSLS 在 X-20C 线站^[7]使用锥形管进行微束 X 射线衍射分析, 样品处焦斑大约 $3 \mu\text{m}$; 美国 CHESS^[8]对椭圆形 X 射线毛细管在同步辐射应用进行了实验, 焦斑可以会聚成 $12 \sim 23 \mu\text{m}$; 欧洲 ESRF 第三代同步辐射在 ID13 线站^[9]上试验了 KB 镜与锥形管的结合, 可以达到 100 nm 。

2 圆锥形 X 光导管的传输特性

图 1 是 X 射线在圆锥形 X 光导管(锥管)中的

收稿日期: 2008-12-24; 收到修改稿日期: 2009-04-16

作者简介: 李玉德(1965—), 男, 硕士, 副研究员, 主要从事导管 X 射线光学方面的研究。E-mail: liyude@bnu.edu.cn

传输示意图。X 射线的传输有三种形式：直射(如光线 c)、一次反射(如光线 b)和多次反射(如光线 a)。与圆柱形导管不同的是，锥管在将 X 射线束压缩至毛细管出口端的过程中，每一次全反射的入射角 θ_i 比前一次入射角增加 2α ，所以第 N 次全反射的入射角 $\theta_N = \theta_1 + 2\alpha(N-1)$ ，其中 α 是锥管的锥角， $\alpha = \arctan\left(\frac{d_1 - d_2}{2l}\right)$ (d_1 为锥管的入口直径， d_2 为锥管的出口直径， l 为锥管长度)。在多次反射的光线中，只有最后一次反射光线的入射角小于全反射临界角 θ_c 的 X 射线，才能被锥管传输。

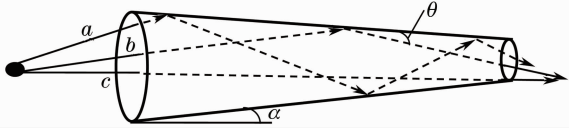


图 1 X 射线在锥管中的传输示意图

Fig. 1 Schematic diagram of X-ray transmission through a tapered capillary

2.1 圆锥形 X 光导管的光强分布

锥管可以将 X 射线束压缩至导管出口端形成几个微米的光束，满足人们对样品微束分析的要求。通过对 X 射线经锥管传输后的光强分布的研究，发

现不同尺寸光源发射的光束经过锥管传输以后，光强分布有着不同的特点。

利用光线追迹原理^[15,16]，使用 Matlab 语言编写了模拟程序。锥管参数：锥管入口端半径 $R_1 = 9 \mu\text{m}$ ，锥管出口端半径 $R_2 = 2.5 \mu\text{m}$ ，锥管长度 $l = 25 \text{ mm}$ ；光源到锥管入口端的距离 $f_1 = 5 \text{ mm}$ ；X 射线能量 $E = 8.0 \text{ keV}$ 。图 2 是点光源发射的光线经过锥管传输后的光强分布计算结果， f_2 表示接收平面到锥管出口端的距离，从左到右 f_2 为 0, 3, 50 mm 处的光强分布平面图。可以看出，对于点光源来讲，锥管出口端近处的光强分布为中心强，边缘弱；随着 f_2 的增加，中心光强会向边缘扩散；而且会在较远处形成多环状的光强分布。

图 3 是面光源发射的光线经过锥管传输后的光强分布模拟结果。光源半径 $r_0 = 5 \mu\text{m}$ ，从左到右 f_2 为 0, 3, 50 mm 处的光强分布平面图。可以看出：对于半径 $r_0 = 5 \mu\text{m}$ 的面光源来讲，光强分布特征与点光源的光强分布有类似的地方，都是在距离出口端比较近处的光强分布中心强，边缘弱；随着 f_2 的增加，中心光强会向边缘扩散，而且会在较远处形成多环状的光强分布。

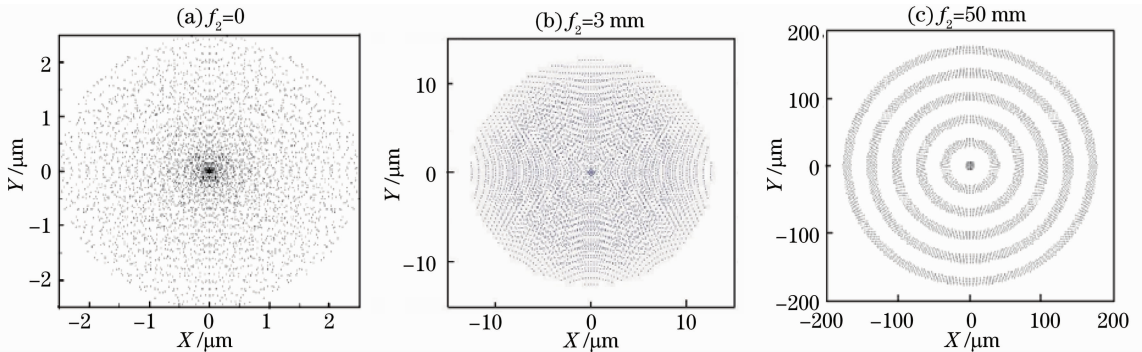


图 2 点光源的光强分布图

Fig. 2 Intensity distribution of a point source

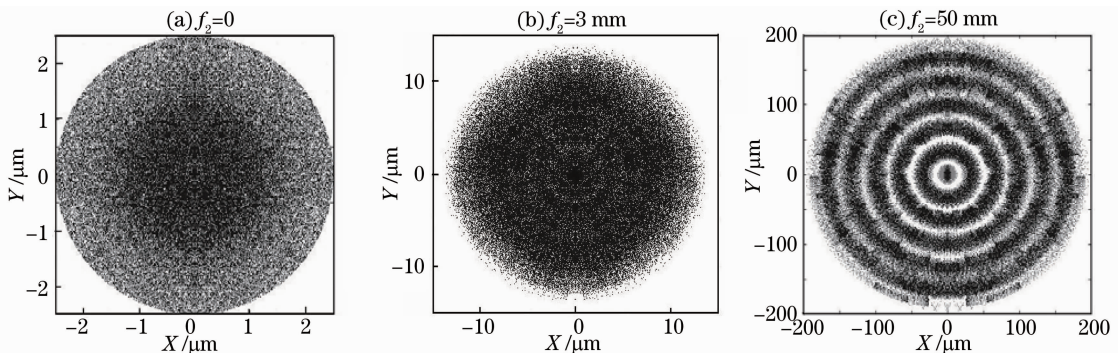


图 3 面光源 $r_0 = 5 \mu\text{m}$ 的光强分布图

Fig. 3 Intensity distribution of surface source with $r_0 = 5 \mu\text{m}$

图 4 是半径为 $r_0 = 12.5 \mu\text{m}$ 面光源发射的光线经过锥管传输后的光强分布模拟结果。图中从左到右依次是到锥管出口端的距离为 0, 3, 50 mm 处的光强分布平面图。图 4 显示的光强分布与图 2, 图 3

有明显的不同: 在 $f_2 = 0$, 即锥管出口端处, 光强分布是中心弱, 边缘强; 随着 f_2 的增加, 光线向中心会聚, 所以在 $f_2 = 3$ 和 50 mm 处, 光强分布是中心强, 边缘弱。

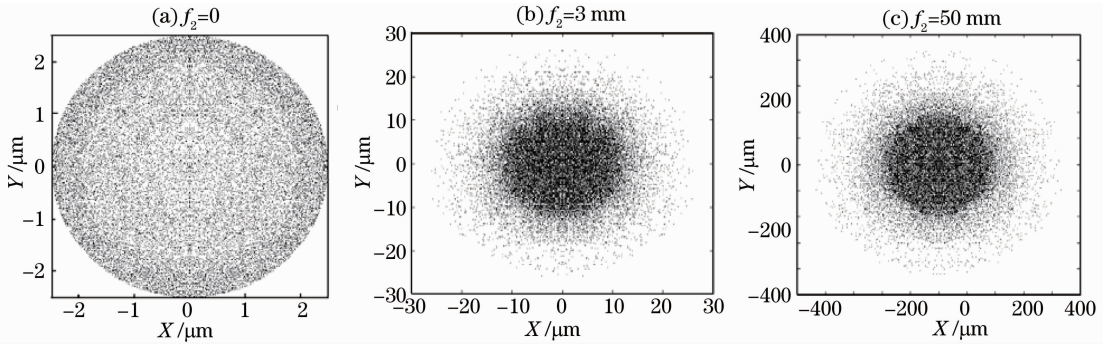


图 4 面光源 $r_0 = 12.5 \mu\text{m}$ 的光强分布图

Fig. 4 Intensity distribution of surface source with $r_0 = 12.5 \mu\text{m}$

以上的计算结果都是针对同一个锥管, 不同的是光源尺寸。从结果可以看出光源尺寸对 X 射线经过锥管传输后的光强分布有很大的影响。经过大量的模拟计算得出如下结论: 当光源半径小于锥管入口半径时, 锥管出口端处光强中心强, 边缘弱, 而且在较远处容易出现多环状分布, 如图 3 所示; 当光源半径大于锥管入口半径时, 锥管出口端处光强中心弱, 边缘强, 在较远处也不会出现多环状分布, 如图 4 所示。

在使用锥管的实际研究工作中, 光源尺寸通常大于锥管入口直径, 即对应图 4 所示情况。可以根据实验使用的 X 射线能量、X 光管焦斑尺寸以及微束分析要求的光斑尺寸, 来优化设计锥管并根据计算的光强分布结果确定样品至锥管出口端的最佳距离。

2.2 圆锥形 X 光导管的功率密度增益

锥管有会聚 X 射线的作用, 功率密度增益 K 是表征导管系统会聚作用的重要参量。功率密度增益定义为 $K = j_2/j_1$, 其中 j_1 是无导管时由 X 光源发射到某一距离处能量为 E 的 X 光功率密度, j_2 是有导管时同一距离处的 X 光功率密度。功率密度增益的大小和 X 射线能量以及接收光阑的尺寸有关。计算了距离锥管出口不同位置处的功率密度增益 K , X 射线能量 $E = 8.0 \text{ keV}$, 接收光阑的尺寸和锥管出口直径相同, 为 $5 \mu\text{m}$ 。计算使用的锥管参数同上: 锥管入口端半径 $R_1 = 9 \mu\text{m}$, 锥管出口端半径 $R_2 = 2.5 \mu\text{m}$, 锥管长度 $l = 25 \text{ mm}$; 光源到锥管入口端的距离 $f_1 = 5 \text{ mm}$ 。图 5 为两种光源半径对应的功率密度增益 K 随 f_2 的变化曲线。可以看出: 在出口端, K 大概 100 左右; $f_2 = 2 \text{ mm}$ 处, K 值降到

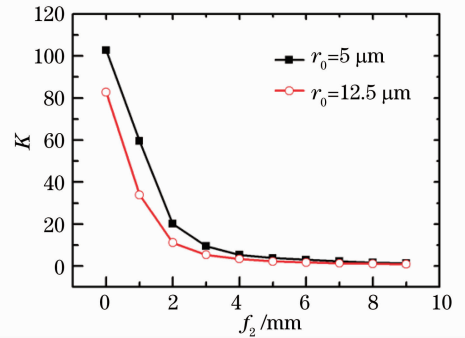


图 5 功率密度增益 K 随 f_2 的变化曲线

Fig. 5 Relation of power density gain K versus f_2

20 左右; $f_2 = 3 \text{ mm}$ 处, K 值降到 10 以下。由此可见, 随着 f_2 的增大, 功率密度增益 K 值迅速下降, 即锥管出口端的功率密度增益 K 最大。

表 1 是 $f_2 < 1 \text{ mm}$ 时的锥管功率密度增益变化, K_1 对应于光源半径 $r_0 = 5 \mu\text{m}$, K_2 对应于光源半径 $r_0 = 12.5 \mu\text{m}$ 。可以看出, 在 1 mm 范围内, 随着 f_2 的增大, K 值基本线性减小。

表 1 功率密度增益 K 随 f_2 的变化

Table 1 Relation of power density gain K versus f_2

f_2/mm	K_1	K_2
0	102.7	82.5
0.1	101.1	80.4
0.2	98.0	76.0
0.3	94.0	70.2
0.4	89.5	64.0
0.5	84.7	58.1
0.6	79.8	52.3
0.7	74.7	47.0
0.8	69.7	42.2
0.9	64.6	37.9

表 1 数据表明,为了提高锥管的使用效果,在实验过程中,样品尽可能靠近锥管出口。

2.3 光源尺寸和 X 射线能量对锥管功率密度增益 K 的影响

锥管的功率密度增益 K 值受光源尺寸和 X 射线能量的影响较大。图 6 是锥管出口端功率密度增益 K 随光源半径 r_0 的变化曲线。计算使用的锥管参数同上:锥管入口端半径 $R_1=9\ \mu\text{m}$,锥管出口端半径 $R_2=2.5\ \mu\text{m}$,锥管长度 $l=25\ \text{mm}$;光源到锥管入口端的距离 $f_1=5\ \text{mm}$;X 射线能量 $E=8.0\ \text{keV}$ 。可以看出,当光源半径 r_0 小于锥管入口半径时,功率密度增益 K 随着 r_0 的增大而缓慢减小;当光源半径 r_0 大于锥管入口半径时,随着 r_0 的增大,功率密度增益 K 值迅速减小。当 $r_0=50\ \mu\text{m}$ 时, K 值已经降到 10 以下。

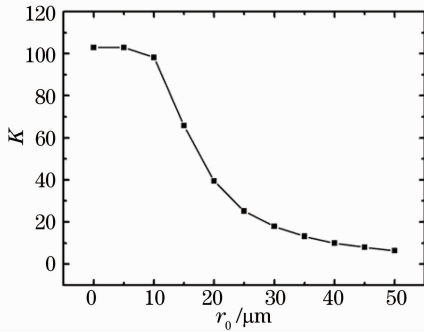


图 6 功率密度增益 K 随光源半径 r_0 的变化曲线

Fig. 6 Relation of power density gain K versus diameter of source r_0

图 7 是功率密度增益 K 随 X 射线能量 E 的变化曲线。其中光源半径 $r_0=10\ \mu\text{m}$,锥管参数同上。可以看出,由于 X 射线全反射临界角随 X 射线能量成反比关系,所以随着 X 射线能量 E 的增加, K 值减小。

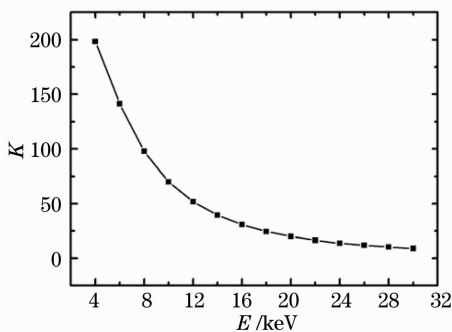


图 7 功率密度增益 K 随 X 射线能量 E 的变化曲线

Fig. 7 Relation of power density gain K versus photon energy E

3 圆锥形 X 光导管的优化设计

根据 X 射线能量、光源尺寸以及微束分析要求的光斑尺寸等具体实验条件,来确定锥管的长度、入口和出口直径等锥管外形尺寸,以期获得最佳的使用效果,这是锥管的优化设计问题。

3.1 锥管优化设计标准

从 2.2 节的讨论可以知道:使用锥管的实验,样品必须靠近锥管出口。这样对任何一个具体的实验,微束分析要求的光斑尺寸明确后,锥管的出口直径就被确定下来,随后需要确定锥管的长度和入口直径。提到锥管的优化设计,人们会想到以 K 最大来作为优化设计标准。提出以最小等效距离来作为锥管的优化设计标准,这样可以消除功率密度增益中工作距离因素带来的影响。如果无导管时离 X 光源较近的某一点处的 X 光功率密度等于有导管时在距离 L 处的 X 光功率密度,则把该点到 X 光源的距离定义为等效距离 L_{eq} ,同样等效距离和 X 射线的能量以及接收光阑的尺寸有关。根据 X 射线衰减和距离平方成反比关系,容易得到: $L_{\text{eq}}=L/\sqrt{K}$ 。等效距离可以简单明了地告诉人们使用毛细管元件的效益,并且可以成为判别毛细管元件优劣的标准。

3.2 锥管优化设计的实例

以一个具体的实验来说明锥管的优化设计。光源条件:假设使用 Cu 靶 K_{α} 特征线,即 X 射线能量取 $8.04\ \text{keV}$;光源半径定为 $25\ \mu\text{m}$ 。光源焦斑至 X 光管窗口的距离为 $15\ \text{mm}$,即可以选择的锥管入口至光源的最短距离,所以取 $f_1=15\ \text{mm}$ 。如果微束分析要求的光斑尺寸为 $5\ \mu\text{m}$,锥管的出口直径就确定为 $5\ \mu\text{m}$,接下来需要确定锥管的入口半径和长度。

固定一个锥管长度 $l=150\ \text{mm}$,改变锥管的入口半径计算功率密度增益,功率密度增益最大时的 $R_1=19\ \mu\text{m}$,即长度为 $150\ \text{mm}$ 时最佳的锥管的入口半径。计算结果如表 2 所示。

表 2 锥管入口半径 R_1 与功率密度增益 K 、等效距离 L_{eq} 的关系

Table 2 Relation of R_1 versus power density gain K and equivalent distance L_{eq}

$R_1 / \mu\text{m}$	K	$L_{\text{eq}} / \text{mm}$
11	474.9	7.57
13	507.1	7.33
15	530.8	7.16
17	546.9	7.05
19	550.7	7.03
21	539.7	7.10
23	511.8	7.29
25	459.4	7.70

按照上述步骤,再改变锥管长度,计算出每一长度下的最佳入口半径,计算结果如表 3 所示。可以看出,功率密度增益 K 随锥管长度的增加而增加,但等效距离 L_{eq} 存在着最小值,即在上述假设的实验条件下,经过优化的锥管长度和入口半径分别为 40 mm, 13 μm 。等效距离 $L_{eq}=6.41$ mm 表示在理想锥管和上述实验条件下,使用锥管后的 X 光强度是将样品紧靠 X 光机窗口时的 5 倍。

表 3 锥管长度 l 、入口半径 R_1 与功率密度增益 K 、等效距离 L_{eq} 的关系

Table 3 Relation of capillary length l , entrance radius R_1 versus power density gain K and equivalent distance L_{eq}

l/mm	$R_1/\mu\text{m}$	K	L_{eq}/mm
20	10	27.8	6.64
30	12	48.4	6.47
40	13	73.5	6.41
50	14	102.6	6.42
60	15	135.0	6.45
90	16	253.2	6.60
120	18	393.3	6.81
150	19	550.7	7.03

4 结 论

对圆锥形 X 光导管传输特性进行了系统的理论研究。通过对 3 种尺寸 X 光源发出的 X 射线经过锥管的光强分布计算,得到光源尺寸和锥管入口直径两种因素共同作用来影响光强分布形式的结论。计算了锥管功率密度增益 K 随距离锥管出口不同位置 f_2 的变化趋势,得到功率密度增益 K 值随 f_2 的增加迅速下降的结论。研究了功率密度增益和光源尺寸的关系,得到结论:当光源半径 r_0 小于锥管入口半径时,功率密度增益 K 随着 r_0 的增大而缓慢减小;当光源半径 r_0 大于锥管入口半径时,随着 r_0 的增大,功率密度增益 K 值迅速减小。以最小等效距离为标准举例说明了锥管的优化设计。

参 考 文 献

1 Tianxi Sun, Zhiguo Liu, Xunliang Ding. Characterization of a polycapillary focusing X-ray lens for application in spatially resolved EXAFS [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2007, **439**(6):

412~414
 2 K. Nakano, K. Tanaka, X. Ding *et al.*. Development of a new total reflection X-ray fluorescence instrument using polycapillary X-ray lens [J]. *Spectrochim. Acta Part B*, 2006, **61**(10): 1105~1109
 3 Lin Xiaoyan, Wang Zhihong, Sun Tianxi *et al.*. Characterization and applications of a new tabletop confocal micro X-ray fluorescence setup[J]. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, 2008, **266**(11): 2638~2642
 4 A. R. Woll, J. Mass, C. Bisulca *et al.*. Development of confocal X-ray fluorescence (XRF) microscopy at the cornell high energy synchrotron source[J]. *Appl. Phys. A*, 2006, **83**(2): 235~238
 5 Sun Tianxi, Xu Guangyu, Liu Zhiguo *et al.*. Application of monolithic capillary X-ray lens in analysis of single aerosol particles[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(9): 1833~1836
 孙天希, 徐光瑜, 刘志国等. 整体毛细管 X 光透镜在大气颗粒物单颗粒分析中的应用 [J]. *光学学报*, 2008, **28**(9): 1833~1836
 6 Sun Tianxi, Xie Yaning, Liu Zhiguo *et al.*. Application of monolithic polycapillary half focusing X-ray lens in focusing the synchrotron radiation [J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(4): 456~460
 孙天希, 谢亚宁, 刘志国等. 利用整体毛细管 X 光半会聚透镜会聚同步辐射[J]. *中国激光*, 2006, **33**(4): 456~460
 7 I. C. Noyan, P. C. Wang, S. K. Kaldor *et al.*. Divergence effects in monochromatic X-ray microdiffraction using tapered capillary optics [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 2000, **71**(5): 1991~2000
 8 Rong Huang, Donald H. Bilderback. Single-bounce monochromators for focusing synchrotron radiation: modeling, measurements and theoretical limits[J]. *J. Synchrotron Rad.*, 2006, (13): 74~84
 9 L. Vincze, C. Riekkel. Status and perspectives of capillary optics at a third-generation synchrotron radiation source[J]. *X-Ray Spectrum*, 2003, **32**: 208~214
 10 A. Bjeoumikhov, M. Erko, S. Bjeoumikhov *et al.*. Capillary μ focus X-ray lenses with parabolic and elliptic profile[J]. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A*, 2008, **587**(2): 458~463
 11 Noyan I. C., Wang, P. C., Kaldor *et al.*. Divergence effects in monochromatic X-ray microdiffraction using tapered capillary optics[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 2000, **71**(5): 1991~2000
 12 C. Riekkel, A. Cedola, F. Heidelbach *et al.*. Microdiffraction experiments on single polymeric fibers by synchrotron radiation [J]. *Macromol.*, 1997, **30**(26): 1033~1037
 13 D. J. Thiel, D. H. Bilderback, A. Lewis. Production of intense micrometer-sized X-ray beams with tapered glass monochromators [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1993, **64**(10): 2872~2878
 14 K. Janssens, B. Vekemans, L. Vincze *et al.*. A micro-XRF spectrometer based on a rotating anode generator and capillary optics [J]. *Spectrochim. Acta Part B*, 1996, **51**(13): 1661~1678
 15 Lin Xiaoyan, Li Yude, Tan Guotai *et al.*. Evaluation of transmitting performance of cylindrical polycapillary[J]. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A*, 2007, **572**(2): 729~733
 16 Xiaoyan Lin, Andong Liu, Yude Li *et al.*. A MATLAB programming for simulation of X-ray capillaries[J]. *Appl. Math. Comput.*, 2006, **172**(1): 188~197