

基于球面晶体的高光谱分辨全视场 X 射线荧光成像

谭伯仲, 阳庆国*, 杜亮亮, 安然, 刘冬兵, 孟立民

中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621900

摘要 提出了一种基于球面晶体的高光谱分辨全视场 X 射线荧光成像仪, 并分析了该成像系统的空间分辨率、视场、能谱带宽、荧光收集效率。根据理论分析设计了一套用于 V~Zn 等典型中等原子序数金属的 K_α 线荧光成像系统, 并采用解析的理论和本课题组编写的蒙特卡罗光线追迹程序对该系统性能进行了计算和仿真。理论分析和数值仿真的结果表明, 这种 X 射线荧光成像技术具有较高的空间分辨率(优于 80 μm)、较大的视场(大于 6.5 mm)以及极高的光谱(能谱)分辨率(优于 16.5 eV@ 4.6~9 keV)。

关键词 X 射线光学; X-ray 光谱; 荧光显微成像; X-ray 成像; 晶体光学

中图分类号 O434.13

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201939.1134001

Spherical Crystal Based on X-Ray Fluorescence Imaging with High Spectral Resolution and Full Field of View

Tan Bozhong, Yang Qingguo*, Du Liangliang, An Ran, Liu Dongbing, Meng Limin

Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China

Abstract In this study, we propose a spherical crystal based on X-ray fluorescence imaging system with high spectral resolution and full field of view (FOV). Further, the spatial resolution, FOV, spectral bandwidth, and photon collection efficiency are analyzed. Next, we present the design of the fluorescence imaging system for the K_α emission of a metal (V-Zn) with median atomic number according to the theoretical analysis, and the analytic theory and a custom-written Monte Carlo ray-tracing code are used in calculation and simulation. Our theoretical analysis and simulation demonstrate that the X-ray fluorescence imaging technique exhibits a high spatial resolution (<80 μm), large FOV (>6.5 mm), and high spectral resolution (<16.5 eV@ 4.6-9 keV).

Key words X-ray optics; X-ray spectroscopy; fluorescence microscopy; X-ray imaging; crystal optics

OCIS codes 340.7440; 300.6560; 170.2520; 110.7440; 260.1180

1 引 言

X 射线荧光光谱分析是一种重要的元素分析方法, 它能够定性或定量给出样品的元素组成及含量, 在工农业、分析化学、环境科学、材料科学、生物学、医学、考古学等领域具有重要应用^[1-3]。随着需求的拓展, 现代荧光光谱分析除了要求能给出样品的元素成分外, 还需要知道元素在样品中的空间分布信息。例如, 在生物或医学诊断中, 如果能够清晰地获得组织中某些微量(金属)元素的空间分布及含量, 那将对临床疾病诊断和生物元素追踪有重大帮助。因此, X 射线荧光光谱成像成为近年来 X 射线荧光分析技术的重点发展方向。

目前, X 射线荧光成像主要有两条技术路线: 一是采用微探针束的 X 射线荧光成像技术(μ-XRF)^[2-7], 它利用 X 射线聚焦光学元件聚焦 X 射线, 对样品的微区进行荧光激发, 利用光子计数型探测器进行荧光收集, 扫描样品的位置获得元素的空间分布。这种技术的优点是对样品横向尺寸没有太大限制, 但若要在大的样品范围内获得高空间分辨的 X 射线荧光图像, 需要进行逐点扫描, 耗时较长。另一种是共焦型全视场 X 射线荧光成像技术^[8-9], 它利用 X 射线对样品进行整体激发, 然后利用 X 射线光学元件(Wolter 显微镜、菲涅耳波带片)收集视场范围内的荧光并成像在面阵探测器上。这种成像系统能够提高光子收集效率, 也不需要机械扫描装

收稿日期: 2019-06-24; 修回日期: 2019-07-09; 录用日期: 2019-07-24

基金项目: 国家自然科学基金(11675277, 11605184, 11805189)

* E-mail: yungore@163.com

置,但是成像系统的视场非常小、景深非常窄,一般需要利用片光源(sheet beam)进行激发。

上述两种 X 射线荧光成像技术大多采用具有光子计数功能的探测器,光子计数型探测器的能量分辨率一般较低(大于 120 eV),当样品的元素组成复杂时,探测器不能很好地进行光谱辨识,如元素 A 的 K 壳层与元素 B 的 L 壳层光谱接近,或者元素 A 的 K_{α} 线与元素 B 的 K_{β} 线接近时,则会导致分析结果不准确。

在高能量密度物理领域,球面晶体被广泛用于 X 射线背光照相^[10-12]。当 X 射线接近正入射时,球面晶体组成的成像系统具有约 10 μm 的空间分辨率、1 eV 的能量分辨率,以及厘米尺寸的视场。在本课题组对球面晶体背光成像研究的基础上,本文提出了一种基于球面晶体的紧凑型高光谱分辨 X 射线荧光成像仪,通过调节狭缝宽度使该成像系统可以工作在远离正入射的情况下,这种全视场的 X 射线荧光成像技术具有大视场、高空间分辨率、高光谱(能谱)分辨率等优点。本文分析了基于球面晶体的荧光成像系统的子午面空间分辨率、视场、能谱分辨率、荧光收集效率;根据理论分析设计了一套用于 V~Zn 等典型中等原子序数金属的 K_{α} 线荧光成像系统,并采用自行编写的蒙特卡罗光线追迹程序对该系统进行了仿真验证。

2 理论分析

2.1 基本方案

球面晶体近轴成像遵循 Coddington 公式^[13],即

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b_m} = \frac{2}{R \sin \theta_0}, \quad (1)$$

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b_s} = \frac{2 \sin \theta_0}{R}, \quad (2)$$

式中: a 为样品到晶体中心的距离; R 为球面晶体的半径; θ_0 为主光线的入射角; b_m 、 b_s 为像方焦距,下标 m 、 s 分别对应晶体子午面和弧矢面。根据衍射理论, θ_0 需要满足 Bragg 条件,具体为

$$2d \sin \theta_0 = n\lambda, \quad (3)$$

式中: d 为晶体的晶面间距; n 为衍射阶数; λ 为 X 射线波长。

求解(1)式和(2)式,可得

$$b_m = \frac{aR \sin \theta_0}{-R \sin \theta_0 + 2a}, \quad (4)$$

$$b_s = \frac{aR}{-R + 2a \sin \theta_0}. \quad (5)$$

在接近正入射的情况下($80^\circ < \theta_0 < 90^\circ$), b_m 、 b_s 相差较小,当探测器放置在 b_m 、 b_s 之间时,子午面和弧矢面均可以获得较高的空间分辨率。一般需要根据感兴趣的入射 X 射线能量来选取晶体材料和晶面,使 θ_0 满足近正入射的条件。但是对于荧光成像系统来说,样品中包含多种待测元素,其特征荧光 X 射线能量覆盖了较宽的能量范围,因此需要改变入射角 θ_0 来分别对不同的元素发出的荧光进行成像。当 θ_0 远离近正入射条件时, b_m 、 b_s 相差较大,子午面和弧矢面难以同时达到较高的空间分辨率。本文提出的荧光成像方案如图 1 所示,将探测器放置在弧矢面聚焦处($b=b_s$),此时弧矢面具有很高的空间分辨率,在入射主光路中放置平行于弧矢方向的狭缝,以限制 X 射线在子午面上的光束锥角,可以有效减少探测器上的弥散斑尺寸 σ_m ,从而提高成像系统在子午面的空间分辨率。图 1 中 a_0 为狭缝到晶体中心的距离, l_m 为晶体有效反射区域长度, O 为球面晶体的球心, S_0 为主光线与样品的交点。

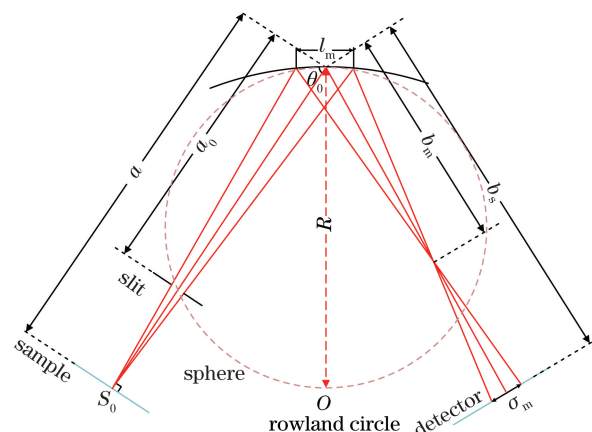


图 1 基于球面晶体的 X 射线荧光成像系统在子午面上的几何示意图

Fig. 1 Geometric diagram of spherical crystal based on X-ray fluorescence imaging system in meridional plane

2.2 等放大比

子午面和弧矢面的放大几何如图 2 所示,对应的放大比公式分别为

$$M_m = \frac{(b_s - f_m)a_0}{f_m(a - a_0)}, \quad (6)$$

$$M_s = \frac{b_s}{a}, \quad (7)$$

式中: M_m 、 M_s 分别为子午面和弧矢面的放大比; a_0 为狭缝到晶体的距离; f_m 为狭缝处发出的 X 射线经过球面晶体聚焦在子午面上的焦距。 a_0 和 f_m 满足子午面聚焦公式:

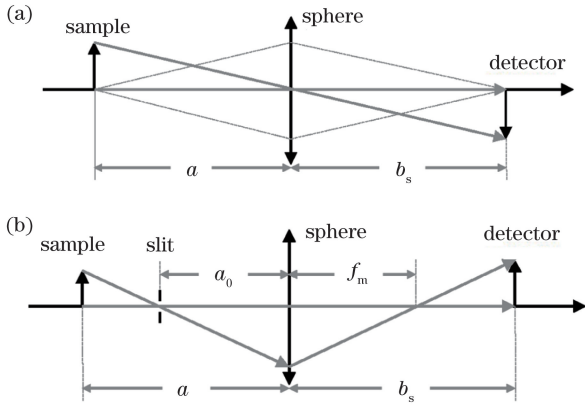


图 2 几何放大比示意图。(a)弧矢面;(b)子午面
Fig. 2 Diagrams of geometric magnification ratio.

(a) Sagittal plane; (b) meridional plane

$$\frac{1}{a_0} + \frac{1}{f_m} = \frac{2}{R \sin \theta_0} \quad (8)$$

结合(4)~(8)式求解得到

$$M_m = \frac{(-a + a_0)R + 2aa_0 \cos \theta_0 \cot \theta_0}{(a - a_0)(-R + 2a \sin \theta_0)} \quad (9)$$

$$M_s = -\frac{R}{R - 2a \sin \theta_0} \quad (10)$$

为了抑制成像系统的畸变,系统子午面和弧矢面需要具有相同的放大比,等放大比时有 $M_m = -M_s$,因此 a_0 需要满足如下关系:

$$a_0 = \frac{aR}{R + a \cos \theta_0 \cot \theta_0} \quad (11)$$

当 $a = R/\sin \theta_0$ 时, $a_0 = R \sin \theta_0$, 狭缝位于罗兰圆上,放大比 $M_m = -M_s = 1$ 。当 $a > R/\sin \theta_0$ 时,狭缝位于罗兰圆外,放大比小于 1,样品在探测器上成缩小像。当 $a < R/\sin \theta_0$ 时,狭缝位于罗兰圆内,放大比大于 1,样品在探测器上成放大像。当狭缝放置于罗兰圆上时,数学上有形式更简洁的解析解,此外,根据模拟结果可知,此时的成像畸变更小,因此下面仅对放大比为 1 的情形进行讨论。

2.3 空间分辨率

将探测器放置在弧矢面聚焦位置,弧矢面的空间分辨率主要受球面像差和面型误差的影响,球面像差一般很小,可以忽略,面型误差主要由晶体加工工艺决定。以下主要分析子午面的空间分辨率,根据图 1 所示的几何关系,样品处一点发出的 X 射线在晶体上的有效反射区域长度 l_m 和探测器上子午面的弥散斑尺寸 σ_m 之间满足:

$$\frac{l_m \sin \theta_0}{b_m} \approx \frac{\sigma_m}{b_s - b_m} \quad (12)$$

结合(4)式、(5)式、(12)式可得

$$\sigma_m = -\frac{2al_m \cos^2 \theta_0}{R - 2a \sin \theta_0} \quad (13)$$

对于单能 X 射线,晶体上的有效反射区域长度 l_m 主要由狭缝宽度 w 和晶体摇摆角(衍射曲线的半峰全宽) θ_{RC} 决定,以下先推导 l_m 和 θ_{RC} 的关系。如图 3 所示,样品上一点 S_0 的最大有效光束张角为 δ , P_1 和 P_2 分别为张角最边缘两条光线与晶体的交点, $P_0 P_1$ 和 $P_0 P_2$ 为过交点的切线, θ_1 、 θ_2 分别为最左和最右两光线的入射角, φ 为两切线的夹角, β 为两半径的夹角,在 $P_0 P_1 S_0 P_2$, $P_0 P_1 O P_2$ 两个四边形中,根据四边形内角和关系可以得到:

$$\delta + \pi - \theta_1 + \theta_2 + \varphi = 2\pi, \quad (14)$$

$$\beta + \pi + \varphi = 2\pi. \quad (15)$$

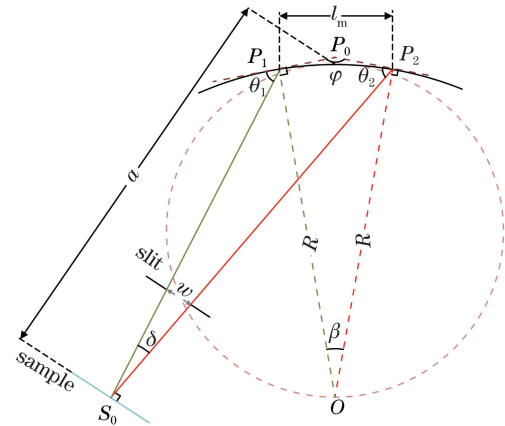


图 3 摇摆角与 l_m 的几何关系示意图

Fig. 3 Geometric relationship between l_m and θ_{RC}

当 δ 和 β 很小时,采用近似可得 $\delta = l_m \sin \theta_0 / a$, $\beta = l_m / R$,结合(14)式和(15)式求解可得

$$\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1 = \frac{a - R \sin \theta_0}{aR} l_m, \quad (16)$$

式中: $\Delta\theta$ 为光线入射角的最大变化范围。当狭缝较大时, X 射线照射的晶体区域大于摇摆角覆盖的区域,超出的区域内光线反射率极低,可以近似为零,即 l_m 由晶体的摇摆角 θ_{RC} 决定,令 $\Delta\theta = \theta_{RC}$,代入(16)式可得

$$l_m(\theta_{RC}) = \frac{aR\theta_{RC}}{a - R \sin \theta_0} = \frac{R\theta_{RC}}{\cos^2 \theta_0} \quad (17)$$

当狭缝较小时,受到狭缝限制, X 射线照射的晶体区域比摇摆角覆盖的区域更小,此时 l_m 由狭缝宽度 w 决定,根据图 3 所示的几何关系容易得到

$$l_m(w) = \frac{aw}{(a - a_0) \sin \theta_0} = \frac{w}{\cos^2 \theta_0 \sin \theta_0} \quad (18)$$

令 $l_m(\theta_{RC}) = l_m(w)$,得到 $w = R\theta_{RC} \sin \theta_0$,当 $w > R\theta_{RC} \sin \theta_0$ 时, $l_m = l_m(\theta_{RC})$,否则 $l_m = l_m(w)$ 。将(17)式和(18)式代入(13)式,可得

$$\sigma_m(\theta_{RC}) = 2R\theta_{RC} \csc \theta_0, \quad (19)$$

$$\sigma_m(\omega) = 2\omega \csc^2 \theta_0, \quad (20)$$

$$\sigma_m = \begin{cases} \sigma_m(\theta_{RC}), & \omega > R\theta_{RC} \sin \theta_0 \\ \sigma_m(\omega), & \omega \leq R\theta_{RC} \sin \theta_0 \end{cases} \quad (21)$$

当 θ_0 减小时, $\sigma_m(\theta_{RC})$ 和 $\sigma_m(\omega)$ 都增大, $\sigma_m(\theta_{RC})$ 取决于晶体摇摆曲线, 当晶体材料和弯曲半径确定后, $\sigma_m(\theta_{RC})$ 无法改变。因此, 远离正入射情况下, 可以通过减小 ω 来获得更小的 $\sigma_m(\omega)$ 。

2.4 子午面视场

根据文献[10], 球面晶体背光成像系统在弧矢面方向很大范围内都满足 Bragg 关系, 因此弧矢面方向的视场一般很大, 以下仅分析子午面方向的视场大小。为了分析狭缝对视场的影响, 需要求解当最边缘的光线 SP 的入射角等于 $\theta_0 + \theta_{RC}$ 时光线在样品上的截距 L_1 。在三角形 SPO 中, 根据正弦定理可得

$$\frac{l_{OP}}{\sin \alpha} = \frac{l_{OS}}{\sin \gamma}, \quad (22)$$

式中: l_{OP} 、 l_{OS} 分别是 OP 和 OS 线段的长度; α 是有

效反射区域最边缘光线与狭缝平面的夹角; γ 是有效反射区域最边缘光线与球面法线的夹角。其中 $l_{OP} = R$, $l_{OS} = R \sin \theta_0 + \omega/2$, $\gamma = \pi/2 - (\theta_0 + \theta_{RC})$, 代入(22)式可得

$$\frac{R}{\sin \alpha} = \frac{R \cos \theta_0 + \omega/2}{\cos(\theta_0 + \theta_{RC})} \quad (23)$$

另外还可以从图 4(a) 中得到以下几何关系:

$$\tan \alpha = \frac{(a - R \sin \theta_0)}{L_1 - \omega/2} \quad (24)$$

根据(23)式和(24)式求解得到 L_1 :

$$L_1 = \omega/2 + \frac{\cot \theta_0}{2} \sqrt{\omega^2 + 4R[\omega \cos \theta_0 + R \sin \theta_{RC} \sin(2\theta_0)]} \quad (25)$$

类似地, 对于图 4(b) 这种情形可以求解得到 L_2 :

$$L_2 = -\omega/2 + \frac{\cot \theta_0}{2} \sqrt{\omega^2 + 4R[\omega \cos \theta_0 + R \sin \theta_{RC} \sin(2\theta_0)]} \quad (26)$$

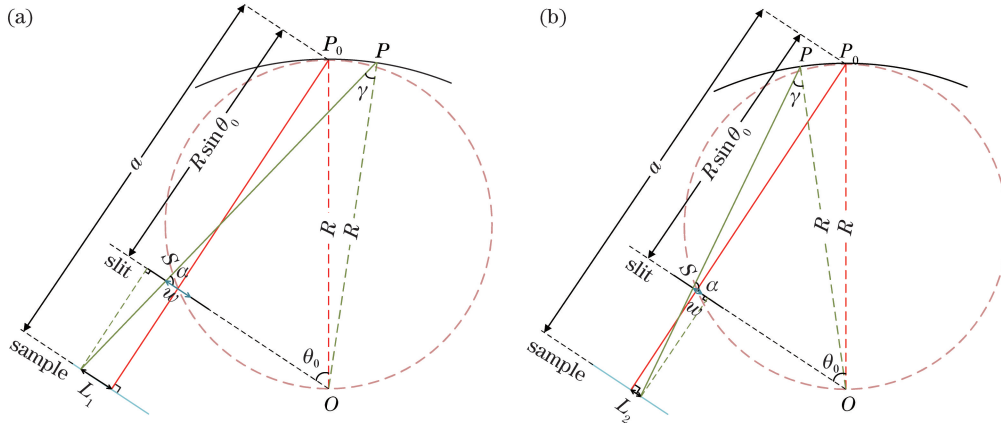


图 4 计算视场中两种可能的几何。(a) P 在 P_0 右边; (b) P 在 P_0 左边

Fig. 4 Two possible cases for calculating the FOV. (a) P is on the right of P_0 ; (b) P is on the left of P_0

从(25)式和(26)式可以看到主光线左、右视场不对称, 左侧的视场比右侧视场大 ω 。除了图 4 所示的两种情形, 还有光线与狭缝右侧边缘相交、入射角为 $\theta_0 - \theta_{RC}$ 等情形, 经过计算某些解为虚数, 不合理, 其他解的视场均小于图 4 的两种情形, 可得总的视场 L 为 L_1 和 L_2 之和:

$$L = \cot \theta_0 \sqrt{\omega^2 + 4R[\omega \cos \theta_0 + R \sin \theta_{RC} \sin(2\theta_0)]} \quad (27)$$

当 θ_0 减小时, 视场也随之减小, 因此在远离正入射的情况下, 应增加狭缝宽度以增加视场。

2.5 能谱带宽

以上的讨论均没有考虑入射 X 射线的能谱分

布, 以下将计算宽谱 X 射线入射情形下系统的能谱带宽。样品上一点发出的荧光到达晶体时, 其入射角包含了一定范围, 因此满足 Bragg 关系的 X 射线都会发生衍射。根据晶体衍射的 Bragg 关系, 对其微分可以得到能谱带宽与 Bragg 角的关系, 即

$$\left| \frac{\Delta E}{E_0} \right| = \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \Delta \theta \cot \theta_0, \quad (28)$$

式中: ΔE 为能量带宽; E_0 为主光线光子能量; $\Delta \lambda$ 为波长带宽。

根据(14)式和(15)式求解可得 $\Delta \theta$ 为

$$\Delta \theta = \frac{a - R \sin \theta_0}{R \sin \theta_0} \delta \quad (29)$$

最大的光束张角 δ 取决于 w :

$$\delta \approx w / (a - a_0). \quad (30)$$

因此,当 $a = R / \sin \theta_0$, $a_0 = R \sin \theta_0$ 时,能谱带宽可以根据(28)~(30)式求解得到:

$$\left| \frac{\Delta E}{E_0} \right| = \frac{w \cos \theta_0}{R \sin^2 \theta_0}. \quad (31)$$

由此可见,成像系统中狭缝的作用除了提高子午面空间分辨率,还可以限制光束张角、减小荧光成像的能谱带宽,实现样品的单色荧光成像,防止多色光谱的成像混叠。

2.6 荧光收集效率

球面晶体对样品处一点发出的荧光的收集效率 ξ ,正比于球面晶体对荧光的收集立体角 Ω 和晶体的反射率 η :

$$\xi = \frac{\Omega \eta}{4\pi}, \quad (32)$$

$$\Omega = \frac{l_m l_s \sin \theta_0}{a^2}. \quad (33)$$

在子午面和弧矢面的有效反射长度分别为 l_m 和 l_s ,弧矢方向在很大范围内都满足 Bragg 关系,因此 l_s 等于晶体弧矢方向尺寸^[10]。将(17)、(18)和(33)式以及 $a = R / \sin \theta_0$ 代入(32)式,可以分别得到 ξ 与 θ_{RC} 和 w 的关系:

$$\xi(\theta_{RC}) = \frac{l_s \tan^2 \theta_0 \sin \theta_0 \theta_{RC} \eta}{4\pi R}, \quad (34)$$

$$\xi(w) = \frac{l_s \tan^2 \theta_0 w \eta}{4\pi R^2}, \quad (35)$$

$$\xi = \begin{cases} \xi(\theta_{RC}), & w > R \theta_{RC} \sin \theta_0 \\ \xi(w), & w \leq R \theta_{RC} \sin \theta_0 \end{cases}. \quad (36)$$

反射率 η 可以用摇摆角内的平均反射率近似得到,即 $\eta \approx \eta_{int} / \theta_{RC}$, η_{int} 为晶体的积分反射率。从

(34)~(36)式可以看到,当 θ_0 减小时,荧光收集效率也随之减小。

3 荧光成像系统示例

在生物和环境科学中,中等原子序数的典型金属(如 Fe、Co、Ni、Cu、Zn 等)在样品中的空间分布信息对相关研究具有十分重要的意义,本文针对这些元素设计了一套球面晶体荧光成像系统。晶体材料选择石英(α -Quartz),将(2023)晶面作为衍射面,晶面间距 $2d = 0.2749$ nm,当入射角 θ_0 在 $30^\circ \sim 80^\circ$ 范围内变化时,能量测量范围为 4.6~9 keV,涵盖了从 V 到 Zn 元素的 K_α 线。虽然球面的曲率半径越小,样品放置的距离越近,光子收集效率越高,但是小曲率半径的晶体曲面加工难度大、良品率低,根据目前晶体的加工工艺,选择球面曲率半径 $R = 150$ mm,弧矢方向长度 $l_s = 10$ mm,晶体厚度为 200 μm 。采用 XOP_2.3^[14-15] 计算得到球面晶体的摇摆角 θ_{RC} 和积分反射率 η_{int} ,计算使用的石英泊松比为 0.08^[16]。

根据第 2 节的理论分析,狭缝宽度减小可以提高子午面的空间和能谱分辨率,但是同时牺牲了成像视场和荧光收集效率,而 $w > R \theta_{RC} \sin \theta_0$ 时,子午面空间分辨率和荧光收集效率只取决于摇摆角。因此,荧光成像系统的相关性能参数均受到狭缝宽度的影响而相互制约,无法找到一个综合的指标对系统性能进行综合评价,所以难以进行目标约束优化以找到最优的系统参数。在系统设计中,空间分辨率是研究中首先关心的指标,因此优先优化空间分辨率,在满足空间分辨率的前提下,选择狭缝宽度使得系统能够兼顾合适的能谱带宽和视场。V 到 Zn 元素的 K_α 线荧光成像性能如表 1 所示。

表 1 V~Zn 的 K_α 荧光成像系统的性能

Table 1 Performance of fluorescence imaging system for K_α of V-Zn

Element	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
E_0 / eV	4953	5414	5900	6405	6931	7480	8046	8637
$\theta_0 / (^\circ)$	65.6	56.4	49.8	44.8	40.6	37.1	34.1	31.5
$\theta_{RC} / \mu\text{rad}$	54	73	98	131	172	220	276	343
$\eta_{int} / \mu\text{rad}$	62	80	96	107	116	124	131	135
$w / \mu\text{m}$	1000	400	200	100	50	10	10	10
$\sigma_m(\theta_{RC}) / \mu\text{m}$	17.8	26.3	38.5	55.8	79.3	109.5	147.8	197.1
$\sigma_m(w) / \mu\text{m}$	2413	1153	685	404	236	55	63.7	73.4
L / mm	7.2	7.8	7.8	7.4	7.2	6.5	7.8	9.3
$\Delta E / \text{eV}$	16.5	11.5	8.7	6.1	4.1	1.1	1.4	1.8
$\xi / 10^{-7}$	14	8	5.5	3.9	2.9	1.1	0.77	0.52

从表 1 可以看到, θ_{RC} 随着 θ_0 减小而快速增大, 当 θ_0 从 65.6° 减少到 40.6° 时, θ_{RC} 对空间分辨率的贡献为 $17.8\sim 79.3\ \mu\text{m}$ 。此时较小的摇摆角就可使子午面具有较高的分辨率, 因此需要优化狭缝宽度以保证较大的视场和较窄的能谱带宽。如图 5 所示, 视场和能谱带宽均随着狭缝宽度 w 的增大而增大, 选择 $w=1\ \text{mm}$, 此时视场为 $7.2\ \text{mm}$, 能谱带宽为 $16.5\ \text{eV}$ 。

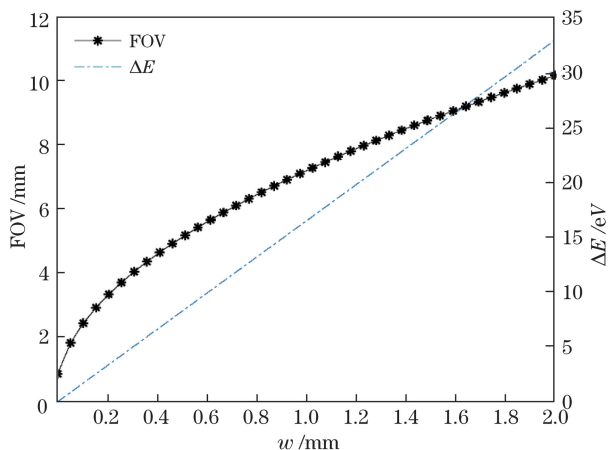


图 5 以 V 为例, 视场和能谱带宽随狭缝宽度 w 的变化
Fig. 5 FOV and spectral bandwidth change with w for vanadium

当 $\theta_0 < 40^\circ$ 时, θ_{RC} 的增加使得空间分辨率显著下降, 需要减小狭缝宽度以提高空间分辨率, $10\ \mu\text{m}$

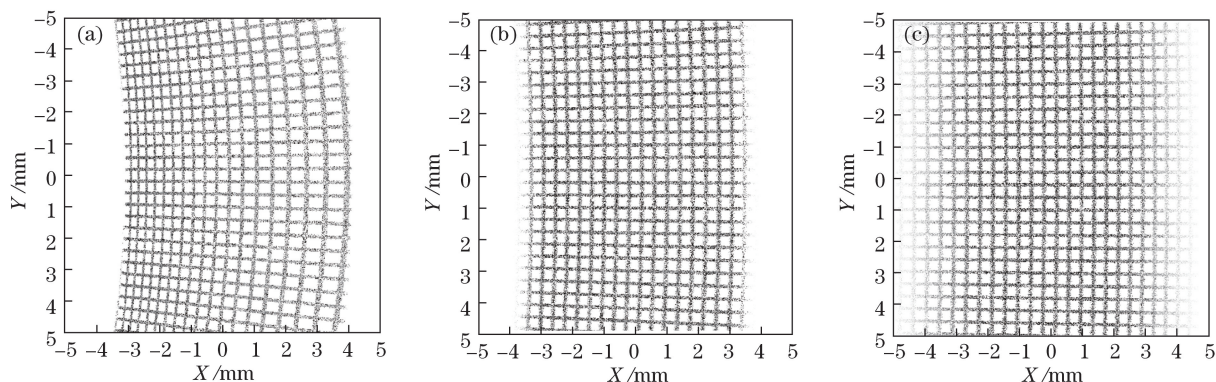


图 6 不同元素的球面晶体荧光成像。(a) V; (b) Fe; (c) Zn

Fig. 6 Images obtained by spherical crystal based on fluorescence imaging for different elements. (a) V; (b) Fe; (c) Zn

4 总 结

本文提出了一种基于球面晶体的 X 射线荧光成像系统, 采用 X 射线管对样品进行整体激发, 然后将球面晶体作为成像和单色化器件, 通过在晶体罗兰圆特定位置上放置狭缝提高子午面空间分辨率, 并对感兴趣荧光 X 射线进行选单, X 射线被晶体收集后成像在面阵探测器上, 用于获得某一种元

的狭缝可以使空间分辨率优于 $73.4\ \mu\text{m}$, 这样窄的狭缝可以使能谱带宽降低到 $1.8\ \text{eV}$ 以下, 同时视场大于 $6.5\ \text{mm}$ 。

从表 1 可以看到, 通过合理设置狭缝宽度可以保证在整个能谱范围内具有优于 $80\ \mu\text{m}$ 的子午面空间分辨率, 并同时覆盖大于 $6.5\ \text{mm}$ 的视场, 能谱分辨率优于 $16.5\ \text{eV}$, 荧光收集效率大于 5.2×10^{-8} 。如果增加另外一块晶面为 $(2\bar{2}43)$ 的石英晶体, $2d=0.2024\ \text{nm}$, 用于 Fe~Zn 的 K_α 成像, 入射角可以限制在 $45^\circ\sim 75^\circ$ 。这样狭缝就仅作为能谱滤波器, 系统的空间分辨率和荧光收集效率可以进一步提高。

为了验证理论分析的正确性, 笔者编写了蒙特卡罗光线追迹程序对系统进行仿真, 样品设置为网格形状, 尺寸为 $15\ \text{mm} \times 15\ \text{mm}$, 网格周期为 $400\ \mu\text{m}$, 棱边宽度为 $100\ \mu\text{m}$ 。晶体摇摆曲线设为高斯函数线型, 狭缝弧矢方向长度为 $2\ \text{mm}$ 。对 V、Fe、Zn 这 3 种元素的 K_α 线荧光成像进行模拟, 参数设置见表 1, 仿真结果如图 6 所示, 为了便于观察, 已经用最大光子数对强度进行归一化。从图 6 可以看到, 网格样品 $100\ \mu\text{m}$ 宽度的棱边可以清晰分辨, 子午面视场为 $7\sim 10\ \text{mm}$, 弧矢面视场大于 $10\ \text{mm}$ 。当 θ_0 较大时, 图像弧矢面存在较大的畸变和视场不对称性。这些特征与本文的理论分析结果基本一致。

素在样品中的空间分布。通过优化狭缝宽度, 该荧光成像系统可以工作在远离正入射的情形下, 从而适合多种元素的荧光成像。针对不同元素设置不同狭缝宽度和入射角度, 可以依次获得不同元素的空间分布。对系统几何参数对空间分辨率、视场、能谱带宽、荧光收集效率等性能的影响进行了理论分析, 并针对 V~Zn 等中等原子序数金属的 K_α 线能量设计了一套荧光成像系统, 该成像系

统具有较大的视场(大于 6.5 mm)、较高空间分辨率(优于 80 μm),以及极高的光谱(能谱)分辨率(优于 16.5 eV@4.6~9 keV)。

参 考 文 献

- [1] Beckhoff B, Kanngießer H B, Langhoff N, *et al.* Handbook of practical X-ray fluorescence analysis[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006.
- [2] Cheng L, Li M T, Wang J L, *et al.* Micro-X-ray fluorescence analysis of colored pigments containing Au on the ancient bowl of Qing dynasty[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(4): 043401.
程琳, 李梅田, 王君玲, 等. 微束 X 射线荧光分析清代金釉碗彩料的化学成分和元素分布[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(4): 043401.
- [3] Sun T X, Liu H H, Liu Z G, *et al.* Application of confocal micro X-ray fluorescence technique based on polycapillary X-ray lens in analyzing medicine with capsule[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(1): 0134001.
孙天希, 刘鹤贺, 刘志国, 等. 毛细管 X 光透镜共聚焦微束 X 射线荧光技术在胶囊类药品分析中的应用[J]. 光学学报, 2014, 34(1): 0134001.
- [4] Yan F, Zhang J C, Li A G, *et al.* Fast scanning X-ray microprobe fluorescence imaging based on synchrotron radiation[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(9): 090702.
闫芬, 张继超, 李爱国, 等. 基于同步辐射的快速扫描 X 射线微束荧光成像方法[J]. 物理学报, 2011, 60(9): 090702.
- [5] Wegrzynek D, Markowicz A, Bamford S, *et al.* Micro-beam X-ray fluorescence and absorption imaging techniques at the IAEA Laboratories [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms, 2005, 231: 176-182.
- [6] Nakano K, Matsuda A, Nodera Y, *et al.* Improvement of spatial resolution of μ -XRF by using a thin metal filter[J]. X-Ray Spectrometry, 2008, 37(6): 642-645.
- [7] Hertz H M, Larsson J C, Lundström U, *et al.* Laboratory X-ray fluorescence tomography for high-resolution nanoparticle bio-imaging[J]. Optics Letters, 2014, 39(9): 2790-2793.
- [8] Hoshino M, Ishino T, Namiki T, *et al.* Application of a charge-coupled device photon-counting technique to three-dimensional element analysis of a plant seed (alfalfa) using a full-field X-ray fluorescence imaging microscope [J]. Review of Scientific Instruments, 2007, 78(7): 073706.
- [9] Takeuchi A, Terada Y, Uesugi K, *et al.* Three-dimensional X-ray fluorescence imaging with confocal full-field X-ray microscope [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2010, 616(2/3): 261-265.
- [10] Schollmeier M S, Geissel M, Shores J E, *et al.* Performance of bent-crystal X-ray microscopes for high energy density physics research [J]. Applied Optics, 2015, 54(16): 5147-5161.
- [11] Yang Q G, Liu D B, Mu J, *et al.* X-ray backlighting of imploding aluminium liners on PTS facility [J]. Review of Scientific Instruments, 2016, 87(9): 093706.
- [12] Schollmeier M S, Knapp P F, Ampleford D J, *et al.* A 7.2 keV spherical X-ray crystal backlighter for two-frame, two-color backlighting at Sandia's Z Pulsed Power Facility [J]. Review of Scientific Instruments, 2017, 88(10): 103503.
- [13] Howells M R. Mirrors for synchrotron-radiation beamlines[M] // Schlachter A S, Wuilleumier F J. New directions in research with third-generation soft X-ray synchrotron radiation sources. NATO ASI Series (Series E: Applied Sciences). Dordrecht: Springer, 1994, 254: 359-385.
- [14] Dejus R J, del Rio M S. XOP: a graphical user interface for spectral calculations and X-ray optics utilities[J]. Review of Scientific Instruments, 1996, 67(9): 3356.
- [15] Rio M S D, Dejus R J. XOP: recent developments [J]. Proceedings of SPIE, 1998, 3448: 340-345.
- [16] Ji S C, Li L, Motra H B, *et al.* Poisson's ratio and auxetic properties of natural rocks[J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2018, 123(2): 1161-1185.