

# x 射线在毛细导管中传输的模拟计算\*

邬鹏举 李玉德<sup>†</sup> 林晓燕 刘安东 孙天希

(北京师范大学射线束技术与材料改性教育部重点实验室, 北京师范大学低能核物理研究所 北京市辐射中心 北京 100875)

(2004 年 12 月 3 日收到 2005 年 2 月 4 日收到修改稿)

阐述了 x 射线在毛细导管中传输的基本理论, 根据光线追迹原理建立了 x 射线在毛细导管中传输的计算模型. 在此基础上使用 MATLAB 编写程序, 实现了对 x 光经过 x 光单导管的传输效率和光强分布的模拟计算. 计算结果和实验数据进行比较, 得到了很好的符合.

关键词: 模拟计算, 毛细导管, 光线追迹, 传输效率, 光强分布

PACC: 0290, 0785

## 1. 引言

20 世纪 80 年代人们在同步辐射源上使用单根空心毛细导管对一些微材料、微样品进行 x 射线微束分析, 推动了导管 x 射线光学的兴起. 20 世纪 80 年代末前苏联科学家库马霍夫提出并研制成功由大量 x 光单导管组合而成的 x 光聚束系统, 也就是被人们通常称作的装配式 x 光透镜. 装配式 x 光透镜体积大、传输效率低、易损坏, 应用领域受到很大限制. 1993—1994 年 x 光透镜技术出现革命性的突破, 美国 XOS 公司和中国北京师范大学低能核物理研究所先后研制成功整体 x 光透镜. 一个整体 x 光透镜通常由 30—50 万根单导管组成, 传输效率高、体积小, 便于携带和安装. 由于整体 x 光透镜的上述优异特性, 它很快被应用到 x 射线仪器设备上. 随着 x 光透镜应用领域的不断扩展, 人们对 x 光透镜的性能也提出了更高的要求. 对 x 射线在 x 光导管中的传输规律进行系统的理论研究, 指导 x 光透镜的研制工艺, 改进和提高 x 光透镜的性能, 成为导管 x 射线光学的重要研究内容.

## 2. x 射线在毛细导管中的传输理论

### 2.1. 基本公式

x 光在均匀介质中的折射率通常表示为:

$$n = \sqrt{1 - \alpha - i\gamma} = 1 - \delta - i\beta, \quad (1)$$

其中  $\alpha$  和  $\delta$  描述介质的极化特性,  $\gamma$  和  $\beta$  描述介质的吸收特性. 电磁波在界面上的反射可用菲涅耳公式描述,

$$\begin{aligned} \frac{E_{rs}}{E_{is}} &= \frac{n_1 \cos\theta_1 - n_2 \cos\theta_2}{n_1 \cos\theta_1 + n_2 \cos\theta_2}, \\ \frac{E_{rp}}{E_{ip}} &= \frac{n_2 \cos\theta_1 - n_1 \cos\theta_2}{n_2 \cos\theta_1 + n_1 \cos\theta_2}. \end{aligned} \quad (2)$$

当 x 射线在真空和理想光滑的介质界面上反射时, 根据斯涅耳折射公式 (2) 式变为:

$$\begin{aligned} \frac{E_{rs}}{E_{is}} &= \frac{\sin\theta - \sqrt{\epsilon - \cos^2\theta}}{\sin\theta + \sqrt{\epsilon - \cos^2\theta}}, \\ \frac{E_{rp}}{E_{ip}} &= \frac{\epsilon \sin\theta - \sqrt{\epsilon - \cos^2\theta}}{\epsilon \sin\theta + \sqrt{\epsilon - \cos^2\theta}}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中介电常数  $\epsilon = n^2 = 1 - \alpha - i\gamma$ , 掠射角  $\theta = \pi/2 - \theta_1$ . 反射系数定义为:

$$\tilde{R}_s = \left| \frac{E_{rs}}{E_{is}} \right|^2, \quad \tilde{R}_p = \left| \frac{E_{rp}}{E_{ip}} \right|^2. \quad (4)$$

对于波长范围 0.01—1nm 的 x 射线掠入射时,  $\tilde{R}_s$  和  $\tilde{R}_p$  的差别在 0.1% 以下, 所以忽略 x 射线偏振的影响, 反射系数  $\tilde{R}$  可用  $\tilde{R}_s$  来表示.

设  $a - bi = \sqrt{\epsilon - \cos^2\theta}$  则

$$\frac{E_{rs}}{E_{is}} = \frac{\sin\theta - a + bi}{\sin\theta + a - bi} \quad (5)$$

其中

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sin^2\theta - \alpha)^2 + \gamma^2 + (\sin^2\theta - \alpha)}$$

\* 北京市优秀人才培养专项经费资助项目

<sup>†</sup>E-mail: Liyd@brc.bnu.edu.cn

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(\sin^2 \theta - \alpha)^2 + \gamma^2} - (\sin^2 \theta - \alpha)}$$

则 x 射线在玻璃导管中传输的反射系数  $\tilde{R}$  表示如下:

$$\tilde{R} = \frac{(a - \sin \theta)^2 + b^2}{(a + \sin \theta)^2 + b^2}, \quad (6)$$

### 2.2. 光线追迹原理<sup>[1]</sup>

入射光线从光源出发, 根据其传输方向  $\mu_i$  和反射面的外法矢  $n$ , 可以得到入射光线与反射面的夹角(掠射角  $\theta$ )及反射光线的传输方向  $\mu_r$ , 如图 1 所示.

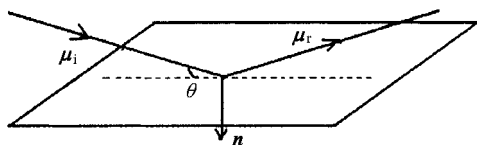


图 1 光线追迹原理图

$$\theta = \sin^{-1}(n \cdot \mu_i) \quad (7)$$

$$\mu_r = \mu_i - 2\mu \sin \theta \quad (8)$$

再把  $\mu_r$  当作入射光线, 循环迭代, 即可追踪光线, 这就是光线追迹的基本原理.

## 3. 理论模型的建立

### 3.1. 光线追迹模型

如图 2 建立坐标系, 光源到管入口端的距离为  $D$ , 管长为  $L$ , 弯管的曲率半径为  $R$ , 光线沿  $x$  轴传输. 光源的圆心坐标为  $(-D, R, 0)$ , 管入口端的中心点坐标为  $(0, R, 0)$ .

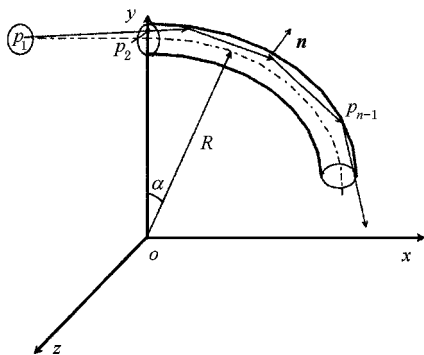


图 2 x 射线在导管传输轨迹图

弯管方程为:

$$(\sqrt{x^2 + y^2} - R)^2 + z^2 = r^2 \quad 0 \leq \alpha \leq L/R \quad (9)$$

光源上任意一点  $p_1 = (x_s, y_s, z_s)$ , 入口面上任意一点  $p_2 = (x_p, y_p, z_p)$ ,

入射距离:

$$s_0 = \sqrt{(x_p - x_s)^2 + (y_p - y_s)^2 + (z_p - z_s)^2} \quad (10)$$

入射单位矢量:

$$\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z) = \frac{(x_p - x_s, y_p - y_s, z_p - z_s)}{s_0} \quad (11)$$

由弯管方程(9), 得弯管的外法线矢量为:

$$n = (n_x, n_y, n_z) = \left( \frac{x(\sqrt{x^2 + y^2} - R)}{r\sqrt{x^2 + y^2}}, \frac{y(\sqrt{x^2 + y^2} - R)}{r\sqrt{x^2 + y^2}}, \frac{z}{r} \right). \quad (12)$$

入射线与弯管的夹角, 即掠射角表示为:

$$\theta = \sin^{-1}(\mu_x n_x + \mu_y n_y + \mu_z n_z). \quad (13)$$

根据微分几何公式(8), 反射光线的方向余弦为

$$\begin{aligned} E_x &= \mu_x - 2n_x \sin \theta, \\ E_y &= \mu_y - 2n_y \sin \theta, \\ E_z &= \mu_z - 2n_z \sin \theta. \end{aligned} \quad (14)$$

交替赋值, 循环迭代, 可以得到任意光线的传输方向.

### 3.2. 数值积分求传输效率和光强分布

假设面光源分割为  $N_1$  份, 导管入口端分割为  $N_2$  份, 则进入导管的总光强为:

$$I_0 = \sum_1^{N_1} \sum_1^{N_2} \Delta K(n_1, n_2),$$

$\Delta K(n_1, n_2)$  为由  $n_1, n_2$  两点所确定的入射光线的强度, 出射总光强包括直射部分  $I_1$  和反射部分  $I_2$  (对于曲率半径较小的弯管, 直射部分为 0).

直射光强表示为

$$I_1 = \sum_1^{N'_1} \sum_1^{N'_2} \Delta I_1(n_1, n_2). \quad (15)$$

反射光强表示为:

$$I_2 = \sum_1^{N'_1} \sum_1^{N'_2} \Delta I_2(n_1, n_2) \times \prod_1^M \tilde{R}_m(\theta_m). \quad (16)$$

其中  $\tilde{R}_m(\theta_m)$  表示反射系数,  $M$  表示反射次数.

传输效率表示为

$$\eta = \frac{I_1 + I_2}{I_0} \quad (17)$$

光强分布的模拟,如图 2 所示.需要计算每一条光线的传输方向.根据全反射条件判断光线是否出管,记录每一条光线与接收平面的交点坐标  $p_n(x_c, y_c, z_c)$  和光线的强度.设  $p_{n-1}(x_p, y_p, z_p)$  与  $p_n$  两点间距离为  $k$ ,交点坐标表示如下:

$$\begin{aligned} x_c &= kE_x + x_p, \\ y_c &= kE_y + y_p, \\ z_c &= kE_z + z_p. \end{aligned} \quad (18)$$

该点光线的传播方向由(13)和(14)式计算.

## 4. 结果和讨论

国内外有关  $x$  射线在毛细导管中传输的理论计算有几种不同的典型算法.美国 Gibson 小组提出的 pseudo-gravitational acceleration (赝重力加速模型)<sup>[2]</sup>,实质是将  $x$  射线在毛细导管中的传输近似为  $x$  射线在管子子午面上的传输,因此是近似结果;日本的 Furuta 小组<sup>[3]</sup>和比利时的 Vincze 小组<sup>[4]</sup>也利用光线追迹原理建立了自己的理论模型,他们的曲线方程与本文的不同,例如比利时 Vincze 小组把弯圆管与  $Z$  轴垂直的面近似为圆面.本文建立的理论模型没有以上近似,根据前面的算法,用 MATLAB 编写计算程序,其中计算光线与导管内壁交点坐标的方法独特,比中国陈宝振<sup>[5]</sup>使用的联立方程组求交点的方法更简洁,且不容易出错.我们不仅计算了导管的传输效率,而且对经导管传输后的光强分布进行了模拟.此光强分布结果对  $x$  光导管的实际应用具有更大的指导意义.

### 4.1. 毛细弯管传输效率的比较

表 1 是我们根据美国 Gibson 小组的实验条件进行传输效率计算的理论和 Gibson 小组的实验结果以及陈宝振、Gibson 小组的理论结果的比较<sup>[6]</sup>.Gibson 小组实验用的光源是 Cu 靶微焦斑光源,文章中未标明尺寸;圆柱形毛细弯管的内半径  $r = 0.003\text{mm}$ ,管长  $L = 150.0\text{mm}$ ,光源到管入口端的距离  $f = 100.0\text{mm}$ .陈宝振和 Gibson 小组给出的都是点光源的理论结果.我们给出点光源和半径为  $0.05\text{mm}$  的面光源的理论结果.

表 1 计算的传输效率同其他理论和实验结果比较

$R/\text{m}$	5.0	2.0	1.0	0.62
陈宝振的理论结果	0.93	0.82	0.65	0.47
Gibson 小组的理论结果	0.95	0.76	0.55	0.30
Gibson 小组的实验结果	0.95	0.78	0.60	0.42
本文面光源的理论结果	0.911	0.795	0.626	0.455
本文点光源的理论结果	0.914	0.798	0.630	0.458

从表 1 中可以看出,我们计算的点光源和面光源的传输效率与 Gibson 小组的实验结果符合较好,且差值很小,说明微焦斑光源可以用点光源来模拟.

### 4.2. 毛细直管传输效率的实验和理论结果

我们在北京师范大学低能核物理研究所  $x$  光学实验室进行了圆柱形毛细直管的传输效率随光源到管入口端距离  $f$  变化的实验测量.实验条件如下: $x$  射线能量  $E = 17.46\text{keV}$ ,光源半径  $r = 0.05\text{mm}$ ,管长  $L = 80\text{mm}$ ,管半径  $r = 0.467\text{mm}$ .表 2 给出实验和理论结果.

表 2 毛细直管传输效率的实验和理论结果

$f/\text{mm}$	60	80	100	120	140	160	180
直管实验结果	0.16	0.23	0.29	0.35	0.39	0.42	0.50
直管理论结果	0.183	0.249	0.307	0.358	0.403	0.445	0.493

从表 2 可以看出,除  $f = 180\text{mm}$  实验点外,其他实验点的理论结果都与实验结果非常接近且略微大于实验值.

### 4.3. 光强分布的模拟结果与实验结果

国内外发表的关于  $x$  射线在毛细导管中传输的理论研究文章大都为传输效率的理论计算.我们还对  $x$  射线经毛细直管出射后的光强分布进行了模拟计算并进行了实验测量.实验条件如下:管长  $L =$

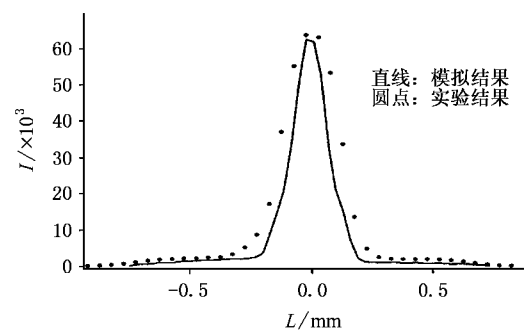


图 3 沿垂直导管轴线方向光强分布的理论与实验结果

80mm,管半径  $r = 0.467\text{mm}$ ; x 射线能量  $E = 8.04\text{keV}$ ,光源半径  $r = 0.05\text{mm}$ ;光源到导管入口距离  $f = 100\text{mm}$ ,导管出口到探测器距离  $d = 108\text{mm}$ .图 3 给出沿垂直导管轴线方向光强分布  $I$  的理论结果与实验结果.

图 4 和图 5 给出弯管的光强分布  $I$  的模拟图. 模拟计算条件:点光源,x 射线能量  $E = 8.04\text{keV}$ ;管长  $L = 150\text{mm}$ ,管半径  $r = 0.003\text{mm}$ ,弯管的曲率半径  $R = 1\text{m}$ ,光源到管的距离  $f = 100\text{mm}$ .

图 4 是接收屏到弯管出口端距离  $d_i = 0\text{mm}$  处

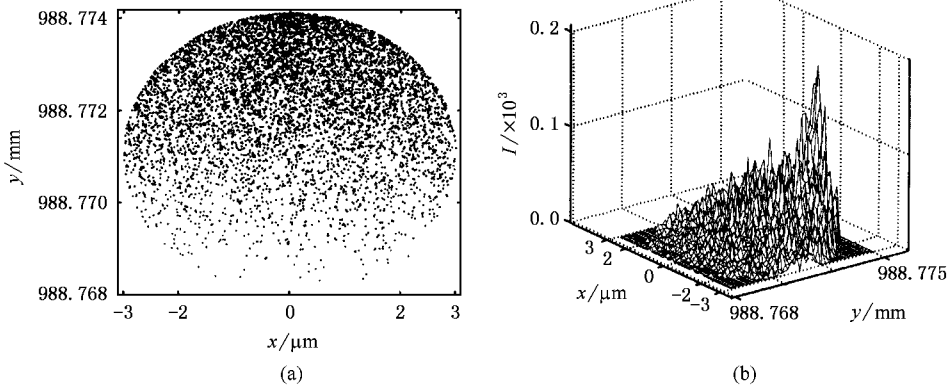


图 4 弯管光强分布平面图和立体图(  $R = 1\text{m}, d_i = 0\text{mm}$  )

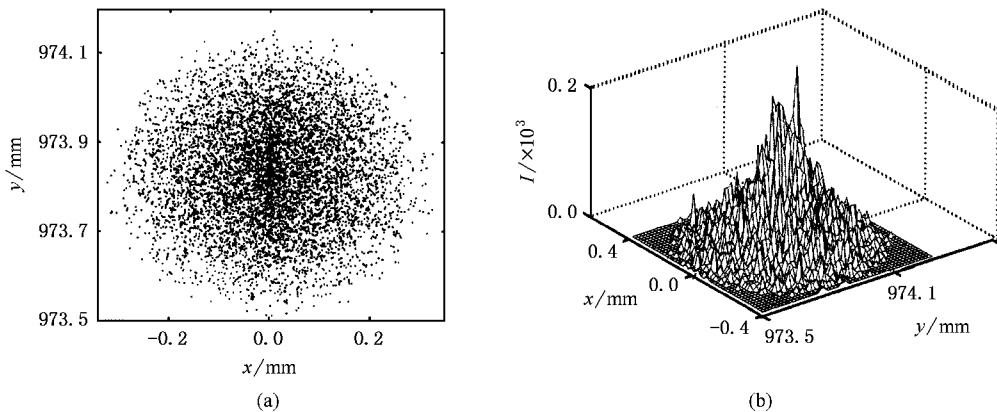


图 5 弯管光强分布平面图和立体图(  $R = 1\text{m}, d_i = 100\text{mm}$  )

的光强分布  $I$  的平面图和立体图. 明显看出光强分布的不对称性,光斑半径与弯管半径相同.如果曲率半径  $R$  趋向无穷大,光强分布趋向对称.图 5 是接收屏到弯管出口端距离  $d_i = 100\text{mm}$  处的光强分布  $I$  的平面图和立体图.可以看出光斑半径变大,光强分布基本对称,中心强,边缘弱.

### 5. 结 论

x 射线作为电磁波,应该用麦克斯韦方程来研

究其在毛细导管中的传输特性.由于我们讨论的毛细导管最小尺寸在微米量级,远远大于 x 射线波长,满足了几何光学近似条件.本文根据光线追迹原理,模拟计算了不同尺寸光源、不同 x 光单导管的传输效率和光强分布,并和国内外的实验结果和理论结果进行了比较,理论结果和实验结果很好地符合说明.用几何光学方法研究 x 射线在毛细导管中的传输特性是完全可以保证计算精度的.另外用理想的点光源研究 x 射线在毛细导管中传输的理论结果可用于微焦斑 x 光源的情况.

- [ 1 ] Wang H Y and Lü L J 2000 *Optics and Precision Engineering* **8** 110  
( in Chinese ) [ 王惠云、吕丽军 2000 光学精密工程 **8** 110 ]
- [ 2 ] Ullich J B ,Kovantsev V and Mac Donald C A 1993 *J. Appl. Phys.*  
**74** 5933
- [ 3 ] Furuta K ,Nakayama Y ,Shoji M *et al* 1993 *Rev. Sci. Instrum.* **64**  
135
- [ 4 ] Vincze L and Janssens F A 1998 *Rev. Sci. Instrum.* **69** 3494
- [ 5 ] Chen B Z 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1933 ( in Chinese ) [ 陈宝振  
2000 物理学报 **49** 1933 ]
- [ 6 ] Chen B Z 1999 *Chin. Phys. Lett.* **16** 630

## Simulation of x-ray transmission through a capillary<sup>\*</sup>

Wu Peng-Ju Li Yu-De<sup>†</sup> Lin Xiao-Yan Liu An-Dong Sun Tian-Xi

( *The Key Laboratory of Beam Technology and Material Modification of Ministry of Education ,  
Institute of Low Energy Nuclear Physics of Beijing Normal University ,  
Beijing Radiation Center , Beijing 100875 , China* )

( Received 3 December 2004 ; revised manuscript received 4 February 2005 )

### Abstract

A ray-tracing theory for the X-ray transmission in a capillary is described based on which a calculation model is built. The transmission efficiency and intensity distribution curve through a capillary are numerically calculated. The simulation results are in good agreement with the experimental results and previous simulations.

**Keywords** : simulation , x-ray capillary , ray-tracing , transmission efficiency , intensity distribution

**PACC** : 0290 , 0785

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation of Outstanding Talents ,Beijing ,China.

<sup>†</sup> E-mail : liyd@brc.bnu.edu.cn