

TOF-SIMS 样品光学成像系统设计

王培智¹, 田地¹, 包泽民¹, 龙涛², 张玉海², 邱春玲¹, 刘敦一²

(1. 吉林大学仪器科学与电气工程学院, 吉林 长春 130021;

2. 中国地质科学院地质研究所, 北京离子探针中心, 北京 102206)

摘要:本研究为飞行时间二次离子质谱仪(TOF-SIMS)设计了一种具有高空间分辨率的样品光学成像系统。该系统由一种改进的 Schwarzschild 双反射系统、45°反射镜、变焦镜头及 CCD 图像传感器构成。采用 ZEMAX 软件对传统 Schwarzschild 模型进行计算和改进, 得出系统优化参数并进行仿真验证。仿真结果表明: 系统最佳的成像分辨率达 1 μm , 极限分辨率为 0.4 μm , RMS 半径小于艾里斑直径, 波像差满足瑞利判据, 成像质量良好。

关键词: 成像系统; Schwarzschild 双反射系统; ZEMAX; 飞行时间二次离子质谱(TOF-SIMS)

中图分类号: TH84; O657.63

文献标志码: A

文章编号: 1004-2997(2015)03-0282-07

doi: 10.7538/zpxb.youxian.2015.0005

Design of TOF-SIMS's Sample Optical Imaging System

WANG Pei-zhi¹, TIAN Di¹, BAO Ze-min¹, LONG Tao²,

ZHANG Yu-hai², QIU Chun-ling¹, LIU Dun-yi²

(1. College of Instrumentation & Electrical Engineering, Jilin University, Changchun 130021, China;

2. SHRIMP Center, Institute of Geology Chinese Academy of Geological Sciences, Beijing 102206, China)

Abstract: A high spatial resolution sample optical imaging system for the time of flight-secondary ion mass spectrometer (TOF-SIMS) was designed. The system consists of an improved Schwarzschild double reflection system, a reflector lens of 45°, a zoom lens and a CCD image sensor. The ZEMAX software was used to calculate and improve the initial Schwarzschild model and give the parameters of improved system. The simulation results show that the best imaging resolution of the system can reach 1 μm , the maximum resolution can achieve to 0.4 μm , and the RMS radius is less than airy disk diameter. The wave aberration can satisfy the Rayleigh judgment, and the image quality shows well.

Key words: imaging system; Schwarzschild double reflection system; ZEMAX; time of flight-secondary ion mass spectrometer (TOF-SIMS)

收稿日期: 2014-05-23; 修回日期: 2014-09-04

基金项目: 国家重大科学仪器设备开发专项《同位素地质学专用 TOF-SIMS 科学仪器》之任务二(2011YQ05006902)资助

作者简介: 王培智(1987—), 男, 博士研究生, 从事二次离子质谱研究。E-mail: wangpeizhi840923@163.com

通信作者: 龙涛(1984—), 男, 助理研究员, 从事质谱仪器研制与应用研究。E-mail: longtao@bjshrmp.cn

网络出版时间: 2015-01-30; 网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/11.2979.TH.20150130.1522.006.html>

微区原位同位素分析方法是地球科学及宇宙空间科学中对锆石以及宇宙尘埃样品有效的技术分析手段^[1]。二次离子质谱仪(SIMS)作为高效的表面分析仪器,可以在样品上数微米的范围内获取精确的同位素和化学组成信息,是一种无需对样品进行化学处理和近于无损伤的分析技术,非常适用于地球和宇宙样品的分析^[2]。以澳大利亚 SHRIMP 为代表的,一批高分辨、高灵敏 SIMS 仪器在原位微区分析中的应用,对地球科学和宇宙空间科学的发展起到了革命性的推动作用。随着地球科学和宇宙科学的快速发展,要求 SIMS 的一次离子束斑更小、消耗样品更少,例如分析用于同位素定年的变质增生壳厚度只有 10 μm 以下的锆石样品^[3]和尺寸只有百纳米级别的宇宙尘埃等。

飞行时间(TOF)质量分析器比磁场质量分析器的质量分辨率高、质量范围宽。北京离子探针中心刘敦一研究员提出将 TOF 质量分析器与 SIMS 结合,研制用于同位素地质学快速微区原位分析的专用飞行时间二次离子质谱仪(TOF-SIMS)。

样品光学成像系统用于实时观察实验样品的测试点位置及一次离子束斑,而一次离子束斑的直径决定了 TOF-SIMS 的空间分辨率^[4],所以样品光学成像系统是仪器的重要组成部分。澳大利亚的 SHRIMP 系列仪器采用双反射显微式物镜结构,可以对样品进行实时观测;法国 CAMECA 公司的 NanoSIMS 50 L 样品光学成像系统把样品在测试位置和光学观测位置往复平移,采用折射式光学显微镜进行观测^[5];德国 ION-TOF 公司在技术上严格保密。以上这些商用化 SIMS 的样品光学成像系统均处于技术保密状态,因此必须自行研制。

本研究建立以 Schwarzschild 双反射系统为核心的初始结构模型,采用 ZEMAX 软件对模型进行计算并改进,希望能设计一套可应用于 TOF-SIMS 的样品光学成像系统。

1 系统初始设计

1.1 总体设计方案

根据系统的要求,采用两级光学系统对样品的图像进行放大和采集。系统结构模拟图示于图 1,系统设计参数列于表 1。

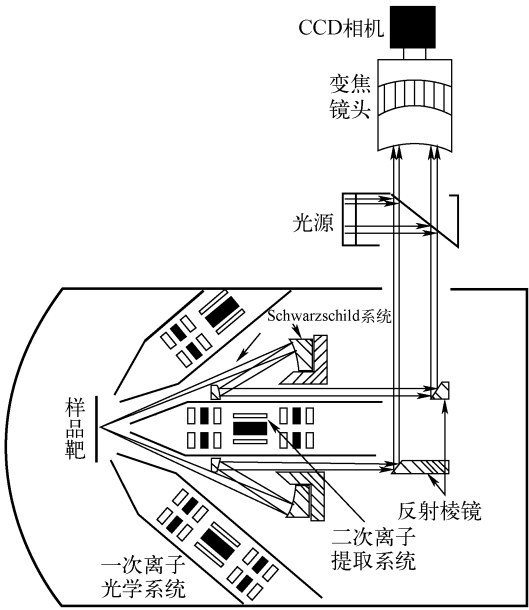


图 1 系统整体结构示意图
Fig. 1 Diagram of system's structure

表 1 系统设计参数
Table 1 Parameters of system design

任务需求	参数
工作波段	400~600 nm
视场范围	≥ 0.5 mm
放大倍数	≥ 500
空间分辨率	μm 级

系统第一级是图像的放大部分,主要由 Schwarzschild 双反射系统和一块 45°反射棱镜构成。传统 Schwarzschild 系统的结构示于图 2,该系统由两块同心的反射镜构成正入射成像系统,在一定的参数设定下,它具有消除三阶球面像差、慧差、像散的特性,成像质量好。45°反射棱镜的作用是将主光轴改变 90°,将与二次离子提取系统重合的主光轴变为与其垂直的光轴结构,同时将光线引出到腔体外部。

第二级是样品图像的二次放大、采集及照

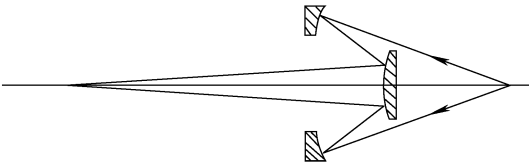


图 2 Schwarzschild 系统结构示意图
Fig. 2 Optical layout of Schwarzschild system

明部分,安装在腔体外部。包括提供系统照明的平行光光源,提供部分系统放大倍率的标准镜头及采集样品图像的数字 CCD 相机。

系统第一级光路中的 Schwarzschild 物镜为系统成像的核心结构,其参数直接影响整个光学系统的性能。

1.2 第一级 Schwarzschild 系统的设计

Schwarzschild 显微镜是典型的正入射成像系统,由两块同心球面反射镜组成,光路结构和参数定义示于图 3。系统中的两片反射镜同心于 R 点, P 为物点, Q 为成像点, PQ 为主

光轴,系统的主要计算变量列于表 2。

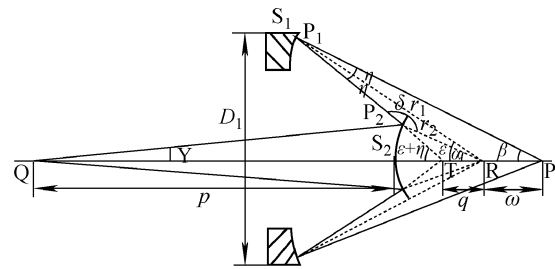


图 3 Schwarzschild 系统的计算简图

Fig. 3 Calculation diagram of Schwarzschild system

表 2 Schwarzschild 系统计算变量

Table 2 Variable parameters of Schwarzschild system

变量	数学意义	变量	数学意义
$r_1 = RP_1$	镜面 S_1 的曲率半径	α	虚线 TP_2 与光轴 PQ 的夹角
$r_2 = RP_2$	镜面 S_2 的曲率半径	β	直线 PP_1 与光轴 PQ 的夹角
$\omega = PR$	物点到球心 R 的距离	γ	直线 QP 与光轴 PQ 的夹角
$P = S_2Q$	像点到镜面 S_2 的距离	δ	直线 P_2P_1 与虚线 P_2R 的夹角
$q = RT$	镜面 S_2 的虚像点到球心 R 的距离	ϵ	虚线 RP_1 与光轴 PQ 的夹角
$g = r_1/r_2$	镜体 S_1 、 S_2 的半径比	D_1	镜体 S_1 的直径
y, z	物点和像点的离轴距离	NA	系统数值孔径值

定义一个变量 x 以便取代物点的位置 ω' ：
 $x = \omega' / (2\omega' + g)$

$$\text{则 } \omega' = \frac{gx}{1-2x}$$

当物点在球面镜的球心时, $x=0$; 当物点在无穷远处时, $x=1/2$ 。根据两镜结构反射系统的理论计算,系统的轴向球面像差^[6]表示为:

$$\begin{aligned} \alpha' = & \frac{gx^2(g-1)}{(2gx-1)^2(1-x)^2} \times \{x^2g^2 + (x-2) \\ & xg + (1-x)^2\} \times \left\{ \epsilon^2 + \frac{1}{12g(1-x)^2(2gx-1)} \times \right. \\ & [18x^2g^4 - 15x^2g^3 + (26x^4 - 103x^3 + 57x^2 + x) \\ & g^2 - (18x^3 - 8x^2 - 2x + 1)g - 17(1-x)^2] \epsilon^4 \} + \\ & \frac{3x^2(g-1)}{(2gx-1)^2} \left[\frac{xg}{(1-x)^2} - \frac{3}{4} \right] \epsilon^4 + O(\epsilon^6) \end{aligned}$$

当 $\epsilon=0$ 时,从上述像差的表达式可以计算出,系统的像点位置为无像差系统的理想像面位置,即:

$$P'_0 = (1 - gx) / (2gx - 1) \quad (1)$$

而只要消除掉 ϵ 角的二阶形式,即可消除三阶系统垂直像差,当系统满足:

$$g^2x^2 + (x-2)gx + (1-x)^2 = 0 \quad (2)$$

系统的三阶球面像差即可消除。解式(2)得出 g (消除三阶球面像差的条件):

$$g = \frac{1}{2} + \frac{1}{x} \pm \left(\frac{1}{x} - \frac{3}{4} \right)^{1/2} \quad (3)$$

系统此时剩余五阶像差及少量更高阶的像差,高阶像差由于对系统的影响较小,可以忽略不计,计算得五阶垂直像差为:

$$\begin{aligned} b' = \alpha' \tan \gamma = (p' - p'_0) \tan \gamma = \\ \frac{3x^2(g-1)}{(1-x)(2gx-1)} \left[\frac{gx}{(1-x)^2} - \frac{3}{4} \right] \epsilon^5 \quad (4) \end{aligned}$$

根据 Jentzsch 定理,对于同心的双反射系统,同轴段的物点和像点的位置与入射角的正弦成正比,即:

$$\sin \beta / \sin \gamma = (p' + 1) / \omega' \quad (5)$$

从物点 P 的不同角度发出的光线会与主光轴交汇于不同 Q 点,产生慧型像差。但是,

当系统的球面像差被修正时,系统的慧型象差也可以被修正,这是因为系统的慧差与正弦条件成正比。当系统满足式(3)时,根据式(5)可以推出系统的放大率为:

$$M = \frac{\sin \beta}{\sin \gamma} - \frac{1-2x}{2gx-1} + 0(\epsilon^4) \quad (6)$$

从式(6)可以看出,系统的放大率在三阶球面像差被修正后只包含五阶的形式,所以系统的三阶慧差为零。通过三阶 Seidel 系数可以证明^[6],在双反射系统中,球面像差、慧差和像散中的 2 个被消除后,另外 1 个也会同时被消除。

本工作设计系统的极限空间分辨率为 $\varphi = 0.5 \mu\text{m}$,采用卤素冷光源,平均波长 λ 约为 550 nm,根据显微系统分辨率公式:

$$\varphi = \lambda / 2NA \quad (7)$$

计算出系统的数值孔径 NA 约为 0.5。系统的第一级镜体的加工直径、系统物距值与系统孔径的数值关系^[7]示于式(8):

$$\begin{cases} NA = \frac{D_1}{2} \sqrt{\left(\frac{D_1}{2}\right)^2 + (\omega + r_1 - D')^2} \\ D' = \frac{\left(\frac{D_1}{2}\right)^2}{r_1 + \sqrt{\left(\frac{D_1}{2}\right)^2}} \end{cases} \quad (8)$$

结合式(2)、(6)、(8)可以得出 Schwarzschild 系统的初始参数模型,主镜与副镜的曲率半径分别为 86.77 mm 和 33.76 mm,两镜间距为 53.01 mm,系统焦距为 27.63 mm,主镜体 S_1 的直径为 108 mm,次镜体 S_2 的直径为 32 mm,物距为 27.35 mm,物镜放大倍数为 98。

1.3 第二级图像采集系统的设计

第二级主要提供系统的照明和样品图像的二次放大和采集。系统光源安装于腔体外部,采用与光路同轴的照明模式,光源产生的平行光通过系统的反射光路照射到样品表面,样品图像再沿着同样的路径传输到外置的数字 CCD 采集回上位机。

整个系统图像的部分放大倍率是由系统外置的变焦镜头完成,这部分采用 Nikon 公司的 28~300 mm 变焦镜头,对图像的放大倍率约为 5~10 倍。结合第一级 Schwarzschild 系统的放大倍数,系统总的放大倍数即可达到 500~1 000 倍。采用 Nikon 镜头的 MTF 曲线示于

图 4,其中 30 lp/mm 和 10 lp/mm 的曲线数值均大于 0.2,说明在 $15 \mu\text{m}$ 左右的分辨率成像质量良好。本系统提供了最大为 10 倍的放大倍率,则第一级 Schwarzschild 系统的空间分辨率只要大于 50 lp/mm,系统的空间分辨率就可以达到 $1 \mu\text{m}$ 。

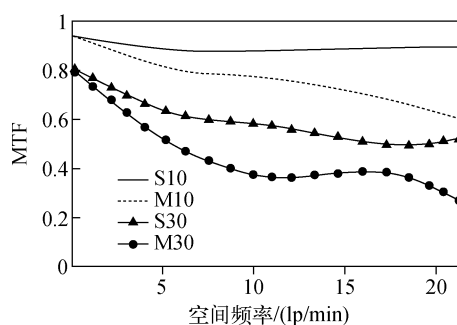


图 4 Nikon 镜头的 MTF 曲线图

Fig. 4 MTF graph of Nikon lens

2 系统改进

采用 ZEMAX 软件对初始模型进行分析及优化,系统参数列于表 3。通过 ZEMAX 软件计算得到初始设计的 Schwarzschild 模型的 MTF 曲线示于图 5。以 MTF 为 0.2 对应的空间频率为最优分辨率作为评价标准,可以得出现阶段系统中心视场的最优空间频率为 50 lp/mm,对应分辨率为 $1 \mu\text{m}$ 。以 MTF 为 0.03 作为系统截止频率的标准,可以得出现阶段系统中心视场的截止空间频率为 108 lp/mm,对应分辨率约为 $0.5 \mu\text{m}$ 。成像系统的光学传递函数在 35 lp/mm 处明显下降,这主要是由系统中心遮拦引起的^[8]。

表 3 系统模型初始参数

Table 3 Initial parameters of the system

界面	半径	厚度	玻璃	半径
OBJ	无限远	0.01000		0.00524
STO	无限远	55.0000		16.4015
2*	无限远	59.4050		14.0000
3*	-86.776	-53.0100	镜面	54.0000
4*	-33.760	450.0000	镜面	16.0000
IMA	无限远			0.06672

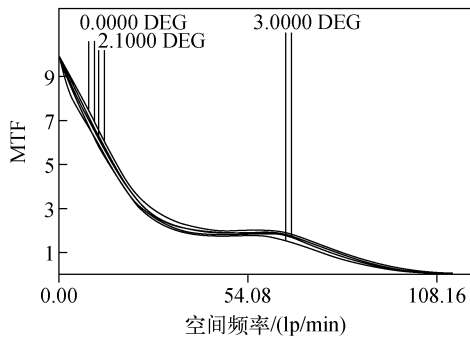


图5 初始 Schwarzschild 系统的 MTF 曲线

Fig. 5 Initial MTF graph of Schwarzschild system

现阶段这种同心结构的 Schwarzschild 系统的视场相对较大,但是大视场带来的问题是中心视场像差较高^[9],因此可以通过改变两片镜体之间的距离,从而减小中心视场的像差,虽然这样会导致系统视场变小,但却可以显著提高中心视场的空间分辨率。在目前设定的镜体参数下,系统的三阶像差、五阶像差系数随着两镜间距的增减所呈现的曲线图示于图 6。

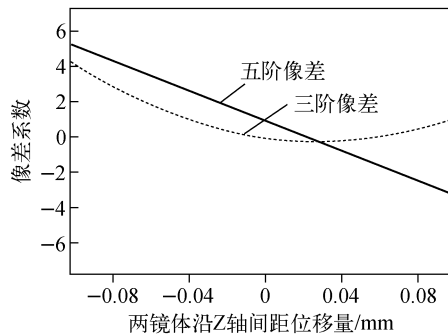


图6 系统中心视场三阶像差、五阶像差曲线图

Fig. 6 Graph of system center view's third and fifth order aberration

从图 6 可以看出,当系统的三阶像差被修正后,系统的五阶像差并不为零,随着两镜间距的增加,系统的三阶像差会变为负值,而五阶像差也在减小。因此可以人为的引入三阶像差和物镜残留的高阶像差平衡^[10-12],并利用 ZEMAX 软件进行优化。优化后的系统结构参数为:增加两镜间距 0.02 mm,即镜体间距为 53.03 mm,其结构示于图 7。

系统改进后的光学传递函数曲线示于

图 8。以 MTF 为 0.03 作为系统截止频率的标准可以得出,现阶段系统中心视场的截止空间频率为 131 lp/mm,即极限空间分辨率约 0.4 μm ,比原模型提高了 0.1 μm 。

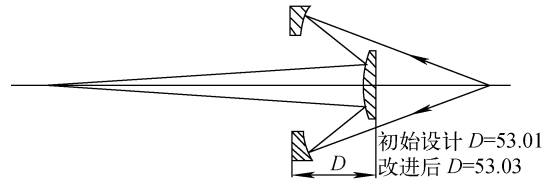


图7 改进后的 Schwarzschild 系统的两镜间距

Fig. 7 Two mirror's spacing of the improved Schwarzschild system

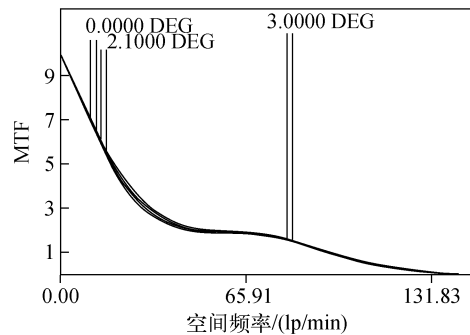


图8 优化后的 Schwarzschild 系统的 MTF 曲线

Fig. 8 MTF graph of optimized Schwarzschild system

3 系统仿真

采用 ZEMAX 软件对所设计的系统进行仿真,主要分析计算系统的光斑聚焦性能、点列图、系统波相差、系统像差等。

在 3 个视场下,以高斯像点为中心,15 μm 为半径的包容圆内所包含能量的占比接近 0.9,光斑聚焦良好,衍射环形圈入能量图示于图 9。

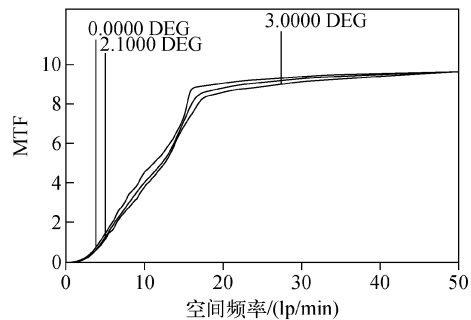


图9 衍射环形圈入能量图

Fig. 9 Plot of diffraction encircled energy

系统的点列图示于图 10。从 0 视场可以看出系统存在初级球差;从 2.1° 和 3° 视场可以看出系统存在较大的慧差,且 3° 视场还存在一定的像散,这在一定程度上会影响系统的边缘视场分辨率,并且对系统的公差比较敏感。不过,3 个视场的 RMS 半径均小于艾里斑直径,说明系统的成像良好,能满足系统的要求。

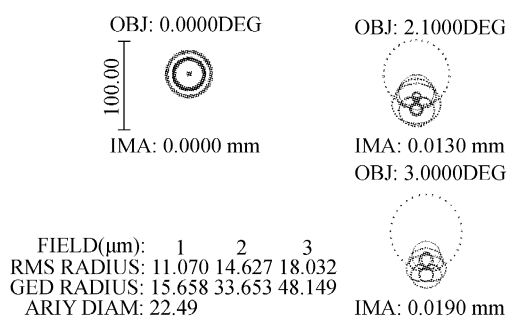


图 10 系统的点列图

Fig. 10 Graph of system's spot

系统的波阵图示于图 11,中心视场的波峰波谷值(PV)为 0.181 1 λ ,小于 $\lambda/4$ 。根据瑞利(Rayleigh)判据,其成像是完善的。

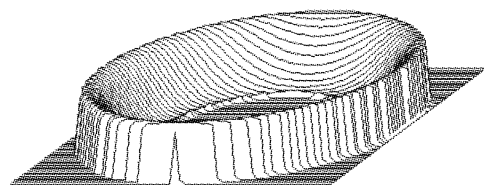


图 11 系统中心视场的波阵面图

Fig. 11 Map of system's wavefront

优化后计算出的系统像差、慧差及像散的数值列于表 4,其中像差最大,存在少量的慧差和像散。

表 4 优化后系统的像差、慧差及像散数值

Table 4 Optimized value of system's aberration, coma and astigmatism

界面	像差	慧差	像散
STO	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0000	0.0000	0.0000
3	1.9087	0.2001	0.0210
4	-1.8849	-0.1976	-0.0207
IMA	0.0000	0.0000	0.0000
TOT	0.0238	0.0025	0.0003

综上,通过分析计算系统的光斑聚焦性能、点列图、系统波相差、系统像差等,可得出该光学系统的 RMS 半径小于艾里斑直径,并满足瑞利判据,是一个低像差可靠的光学成像系统。

4 结论

本工作设计了一种高空间分辨率的 TOF-SIMS 样品光学成像系统。通过仿真计算,系统的最佳分辨率达到 1 μm ,极限分辨率为 0.4 μm ,放大倍数可调, RMS 半径小于艾里斑直径,波像差满足瑞利判据,成像质量良好。

参考文献:

- [1] 丁梯平. 激光探针稳定同位素分析技术的现状及发展前景[J]. 地学前沿, 2003, 10(2): 203-208.
- [2] DING Tiping. The present situation and development prospects of laser probe stable isotope analysis[J]. Earth Science Frontiers, 2003, 10(2): 203-208(in Chinese).
- [3] 周强, 李金英, 梁汉东, 等. 二次离子质谱(SIMS)分析技术及应用进展[J]. 质谱学报, 2004, 25(2): 113-120.
- [4] ZHOU Qiang, LI Jinying, LIANG Handong, et al. Recent developments on secondary ion mass spectrometry[J]. Journal of Chinese Mass Spectrometry Society, 2004, 25(2): 113-120(in Chinese).
- [5] TREVOR R, IRELAND, WILLIAMS I S. Considerations in zircon geochronology by SIMS[J]. Reviews in Mineralogy and Geochemistry, 2003, 53(1): 215-241.
- [6] 王铮, 曹永明, 李越生, 等. 二次离子质谱分析[J]. 上海计量测试, 2003, 30(3): 42-46.
- [7] WANG Zheng, CAO Yongming, LI Yuesheng, et al. Secondary ion mass spectrometry [J]. Shanghai Measurement and Testing, 2003, 30(3): 42-46(in Chinese).
- [8] 布莱恩·罗伯特·巴纳德. 中国:用于表面分析的光谱仪及表面分析方法. 中国:CN1967224A [P]. 2011-2-23.
- [9] PAUL E. Mirror anastigmat with two concentric spherical surfaces[J]. Journal of the Optical Society of America, 1959, 49(9): 877-886.
- [10] LAN S, WILLIAM T, SILFVAST, et al. Development of a new high-resolution optic for soft

- X-ray reflection imaging. USA: F49620-93-1-0397[P], 1996-11-22.
- [8] LIU K, LI Y Q. Development of a $20\times$ schwarzschild projection optics for principle experiment of EUV at-wavelength interferometry [C]. Proc of SPIE, 2009: 72840E.
- [9] ARTIOUKOV I A, KRYMSKI K M. Schwarzschild objective for soft X-rays[J]. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 2000, 39(8): 2 166-2 169.
- [10] BOLLANTI S, DILAZZARO P, FLORA P, et al. Further comparisons between the conventional and the modified Schwarzschild objectives [J]. Appl Phys B91, 2008, (127-137): 128-136.
- [11] 王新, 穆宝忠, 黄怡, 等. 13.5 nm Schwarzschild 显微镜系统及成像实验[J]. 光学精密工程, 2011, 19(8): 1 709-1 715.
- WANG Xin, MU Baozhong, HUANG Yi, et al. 13.5 nm Schwarzschild microscope and imaging experiment[J]. Optics and Precision Engineering, 2011, 19(8): 1 709-1 715(in Chinese).
- [12] 黄怡, 穆宝忠, 王新, 等. 等离子体诊断用 Schwarzschild 显微镜的光学设计[J]. 强激光与粒子束, 2011, 23(2): 397-402.
- HUANG Yi, MU Baozhong, WANG Xin, et al. Optical design of Schwarzschild microscope for plasma diagnostics[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2011, 23(2): 397-402(in Chinese).

“2015(第9届)中国科学仪器发展年会”在京召开

2015年4月22日,中国科学仪器行业的“达沃斯论坛”——2015(第9届)中国科学仪器发展年会(ACCSI 2015)在北京京仪大酒店召开,会议主题为“创新创造价值”。本届年会由中国仪器仪表行业协会、中国仪器仪表学会、中国仪器仪表学会分析仪器分会、仪器信息网联合主办,首都科技条件平台、我要测协办。

年会主办方特别邀请了中国仪器仪表行业协会秘书长闫增序分析总结2014年科学仪器行业发展状况,并对2015年行业发展情况做出预测。中国仪器仪表学会分析仪器分会理事长关亚风则介绍了科学仪器近年来最新技术进展,并对未来发展趋势进行了展望。中国仪器仪表学会秘书长朱险峰则分享了我国对科学仪器制造业发展进行的战略研究结果。仪器信息网市场研究中心主任刘向东以大量的市场调研数据剖析了科学仪器市场需求所在。

ACCSI 2015开设了科学仪器研发成果转化推进研讨会、快速检测技术论坛、科学仪器新技术热点应用论坛、科学仪器制造信息化建设论坛、科学仪器标准化论坛、科学仪器行业互联网营销峰会、实验室用试剂发展圆桌论坛等7个分论坛。

作为ACCSI 2015的“重头戏”,年会主办方在晚宴现场颁布了多项大奖,包括“2014科学仪器优秀新产品”、“2014绿色仪器”、“2014最受关注仪器”、“2014最具影响力厂商”、“2014最具成长潜力企业”、“2014企业年度人物”、“第2届科学仪器研发特别贡献奖”等。

(仪器信息网供稿)