

文章编号 1004-924X(2007)03-0362-06

# 弧矢压弯晶体的力学性能与形位误差分析

凤良杰,董晓浩,康 乐,徐朝银

(中国科学技术大学 国家同步辐射实验室,安徽 合肥 230029)

**摘要:**介绍了利用柔性铰链机构对弧矢聚焦双晶单色器中第二晶体进行动态压弯的工作原理,优化了压弯机构和晶体的几何参数,然后应用有限元方法模拟分析压弯装置与晶体的力学性质,最后分析了弯晶的形位误差并计算因此造成的弯晶光束入射角的变化。分析结果表明:替换后单色器的水平接收角由 1 mrad 增加到 3 mrad,样品上光斑的水平半高宽由 12.5 mm 减小到 2.5 mm。优化后晶体因压弯产生的鞍形曲率半径约为弧矢曲率半径的 1 700 倍,造成的入射角误差为 2.2  $\mu$ rad;压弯装置上的最大平均应力约为 800 MPa,并由此确定了以铍青铜作为压弯机构的材料,晶体的曲率半径为 0.57~1.72 m 和驱动力为 8~2.67 N 时的线性关系。分析结果表明:该单色器的设计完全达到了设计指标,在提高光子通量和光子密度的同时又能满足 XAFS 光束线测量过程中需要频繁快速扫描的要求。

**关键词:**弧矢聚焦;双晶单色器;柔性铰链;压弯机构;形位误差

中图分类号:TL544 文献标识码:A

## Mechanical property of sagittal focusing crystal and effect of slope error on incidence angle

FENG Liang-jie, DONG Xiao-hao, KANG Le, XU Chao-yin

(National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

**Abstract:** The principle of dynamically bending of the crystal in a sagittal focusing monochromator by flexural hinge-based bender was presented and the geometric parameters of bender and crystal were optimized. Then the mechanical properties of bender and crystal were analyzed with Finite Element Method. Finally, the effect of slope error on the incident angle was calculated. The analyzed results indicate that the acceptance angle of the monochromator increases from 1 mrad to 3 mrad, and the horizontal width (FWHM) of the spot on the sample reduces from 12.5 mm to 2.5 mm after replacement. The anticlastic curvature caused by bending is 1 700 times as long as the sagittal curvature, and the incident angle error is only 2.2  $\mu$ rad. The Von Mize stress on the bender is about 800 MPa. When Beryllium-Cu is selected as the material of the bender, the linear relationship between the curvature of crystal in 0.57~1.72 m and the driving forces in 8~2.67 N is obtained. The analyzed results also indicate that the designing parameters are achievement in that the flux and photo intensity are increased

收稿日期:2006-03-23;修订日期:2006-12-20.

基金项目:国家自然科学基金项目(No. 10575098)

and the requirement of fast and tunable scanning on the XAFS measurement is satisfied at the same time.

**Key words:** sagittal focusing; double crystal monochromator; flexural hinge; bender; slope error

## 1 引言

在同步辐射 X 射线光束线中,通常使用两块独立的平面晶体,以 $(+n, -n)$ 消色散排列,同时受相互间运动关系制约,组成常见的固定光束位置输出的双晶单色器。但多数 X 射线吸收精细结构(XAFS)研究,除要求 X 光源有优质的单色性能外,还需要有较小的成像束斑。这类光束线的标准配置是:单色器前面设有一块准直镜,将光束在垂直方向上变成平行光束,后面配有一块水平聚焦镜,把分离出的单色光束聚焦到样品上,这样既提高了能量分辨率,又缩小了束斑尺寸,增加样品的光子通量。但是受到镜子表面镀层材料对 X 射线反射率的限制,光束能达到全反射的掠入射角很小,一般为几个毫弧度,在不损失光子通量的前提下弧矢聚焦镜在入射方向一般长达 1 m 左右,这样在现时的实验大厅光束线空间排布上已不再可能。利用合肥光源设计改造 X 射线光束线,一个重要原则是在满足实验基本要求的前提下,尽量减少光学元件,以保证最大的传输效率。为此本文选择了目前在同步辐射光学结构中较为流行的弧矢聚焦双晶单色器,第一晶体为水冷平晶,第二晶体由柔性铰链压弯机构在弧矢方向上压弯成柱面,把第一晶体衍射出的单色光束在水平方向上聚焦,使成像束斑的水平尺寸由原来的半高宽 12.5 mm 缩小到 2.5 mm,同时又将单色器的水平接收角由 1 mrad 拓宽到 3 mrad,在不影响能量分辨率的情况下,增加了光子通量和样品上的光子密度,无疑这是在不改变基本配置和空间排布的情况下,改造和提升光束线的有效途径<sup>[1]</sup>。

## 2 弧矢聚焦单色器光学结构与设计参数

在广泛应用于同步辐射 X 射线的双平晶单

色器基础上,将第二晶体沿弧矢方向弯曲,既分光单色,又能水平聚焦光束,以缩小样品上的束斑,简化光学元件,提高光子的辐照密度。本文介绍的单色器用于合肥光源上 XAFS 光束线的改造,将现行的双平晶单色器改为弧矢聚焦单色器,改造后的光学结构如图 1 所示。入射光束经双向可调光阑和单色器入射狭缝限制成水平接收角和垂直张角分别为 3 mrad 和 0.1 mrad,经第一晶体衍射分光,第二晶体弧矢聚焦,以 1:4.88 的缩比成像到样品上。单色器选用结构完美的人工晶体 Si(111)作为色散元件,两晶体按 $(+n, -n)$ 消色散排布,Bragg 转动中心选择在第二块晶体表面且垂直于入射平面的对称轴线上。能量扫描时,第二晶体绕 Bragg 转动轴线旋转,其弧矢半径随 Bragg 角变化动态压弯,这种结构的特点是:(1)第一晶体的法向平移由扫描机构的联动完成,以补偿从第二晶体输出的光束随 Bragg 角改变在垂直方向所产生的漂移量,使入射光线与出射光线的垂直落差 20 mm 保持不变;(2)第一晶体的切向运动被适当加长晶体长度所代替,保证入射束斑在扫描过程中始终能被晶体接收;(3)Bragg 转动轴线选择在弧矢弯晶表面,以缩短弧矢柱面长度,降低晶体弯曲过程中在子午方向产生的鞍型形变。同时考虑到夹持部分的边缘效应和进一步抑制鞍型形变,第二晶体在弧矢方向的宽度适当增加,背面刻有肋板。单色器设计参数列于表 1。

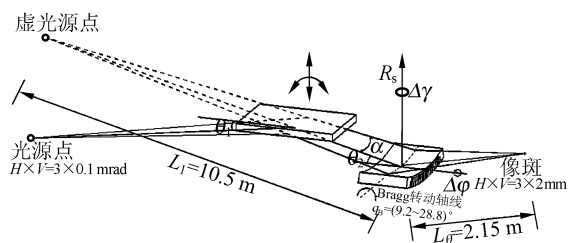


图 1 弧矢聚焦双晶单色器光学结构

Fig. 1 Optical structure of double crystal monochromator with sagittal focusing

表 1 弧矢聚焦双晶单色器设计参数

Tab. 1 Design parameters of sagittal focusing monochromator

分光晶体能量覆盖范围	4.1~12.4 keV(0.1~0.3 nm)
晶体接受光束窗口( $H \times V$ )	3 mrad $\times$ 0.1 mrad
样品上的光子通量	$>10^9$ (phs/s/100 mA)
能量分辨率 $\Delta E/E$	$10^{-4}$
样品上的束斑尺寸( $H \times V$ )	2.5 mm $\times$ 2 mm(FWHM)
第一晶体尺寸( $l \times w \times h$ )	60 mm $\times$ 40 mm $\times$ 5 mm (平面)
第二晶体尺寸( $l \times w \times h$ )	30 mm $\times$ 78 mm $\times$ 7 mm (肋板结构)(柱面)

### 3 弧矢弯晶结构

对一个等截面的块状晶体,在理想情况下,若两端施加纯弯曲力矩时,晶体上沿  $X$  轴方向某一

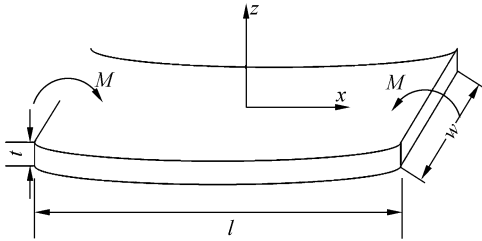


图 2 晶体的弯曲

Fig. 2 Bending deformation of crystal

点的曲率和该点横截面上的力矩  $M(x)$  满足梁的弯曲方程,如图 2 所示,即

$$\frac{d^2 z}{dx^2} = \frac{M(x)}{EI}, \quad (1)$$

式中  $E$  为杨氏模量,  $I$  为惯性矩。在晶体的两端施加相等力矩,可将晶体压弯成圆柱形,则柱面半径与力矩之间的关系为

$$M = \frac{EI}{R_s}, \quad (2)$$

晶体的弧矢弯曲会导致子午方向的鞍型弯曲(垂直于弧矢面的反向弯曲),这种弯曲会造成晶体衍射面与入射光线之间 Bragg 角的偏差,其值可表示为<sup>[2]</sup>:

$$\Delta\theta = \frac{d}{R_{ac} \sin\theta_B}, \quad (3)$$

式中  $d$  为光束垂直尺寸,  $R_{ac}$  为鞍型半径。在实际晶体弯曲过程中,常采取两端对称压弯,因此弧矢弯曲半径  $R_s$  与鞍型变形半径  $R_{ac}$  之间的关系为:

$$\frac{s_{13} R_{ac}}{R_s} = 1 + \frac{2}{3} \left( 1 + \frac{s_{13}}{s_{33}} \right) \frac{w^2}{l^2}, \quad (4)$$

式中  $s_{13}$  与  $s_{33}$  为晶体顺服常量,晶体 Si(111) 的  $s_{13}/s_{33} = 0.279$ , 对于宽为 78 mm, 长为 30 mm 的晶体,  $R_{ac}/R_s = 24.24$ , 若  $R_s = 1$  m, 按式(3)计算得到入射光线 Bragg 角的偏差  $\Delta\theta \approx 147 \mu\text{rad}$ , 远大于 Darwin 宽度的几到几十个微弧度, 大大地降低了晶体衍射效率。为了尽量减小鞍型变形, 我们在晶体底部刻有肋板<sup>[3]</sup>, 经过优化后如图 3 所示。这种结构的晶体压弯后, 鞍型半径  $R_{ac}$  与弧矢曲率半径  $R_s$  的关系应满足:

$$R_{ac}/R_s = (-\nu^{-1}) [1 + (w/e)(h/t)^3 (1 - \nu^2)], \quad (5)$$

式中  $h$  是肋拱的高度,  $w$  是肋拱的宽度,  $e$  是肋拱间距,  $t$  是晶体的厚度,  $\nu$  是 Poisson 系数。根据图 3 所示的结构参数,  $\nu = 0.17$ ,  $w = 0.4$  mm,  $e = 1$  mm,  $h = 6.3$  mm,  $t = 0.7$  mm, 计算结果  $R_{ac}/R_s = 1720$ 。由此得到  $R_s = 1$  m 时(光束垂直尺寸  $d = 1$  mm), 鞍型变形造成的入射光 Bragg 角误差为  $\Delta\theta = 2.2 \mu\text{rad}$ , 小于晶体的本征衍射角宽度。这一结果也被有限元分析所验证。

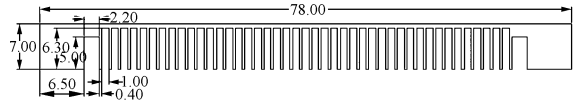


图 3 第二晶体的几何结构

Fig. 3 Geometric structure of the second crystal

## 4 压弯机构与晶体的力学分析

### 4.1 压弯机构的主要参数

XAFS 测量是根据已知元素, 选择在某一能量附近连续扫描, 以获取吸收谱, 因此能量的频繁、随机扫描是对弧矢聚焦双晶单色器设计的基本要求。为了在固定样品上得到与 Bragg 角相对应波长的聚焦束斑, 需要精确动态地控制施加在晶体两端的力矩, 改变晶体弧矢半径。1992 年 ESRF 设计制造了第一个柔性铰链压弯机构<sup>[4]</sup>, 这种机构以四个结构相同的单轴柔性铰链组成弯曲单元(如图 4 所示对称分布的两个压弯单元), 每两个铰链所在的连杆轴线经优化相交于晶体的表面距有效长度端点  $1/6$  长度处, 若晶体厚度很小, 则作用在晶体两端的力矩是纯弯曲力矩。该机构具有高精度、高稳定性、无空回、无摩擦, 再现性好等特点, 所以除上节介绍的晶体结构外, 优化

弯曲机构是弧矢聚焦单色器设计的又一关键技术。图 4 就是经优化即将用于单色器中的柔性铰链压弯机构。由于在所要求的能量范围的高能端 (12.4 keV) 所对应的晶体弧矢半径比较小 (0.57 m),若用不锈钢材料制作会超过其屈服强度,因此选用了铍青铜,其基本参数为: $E = 115$  GPa、泊松比 0.33、屈服强度 1.15 GPa。柔性铰链最小厚度  $t$  定为 0.14 mm、切割半径  $R$  为 3 mm<sup>[5]</sup>。放置晶体的槽长度为 79 mm,两端各为晶体留出 0.5 mm 空隙,晶体被夹持部分长度为 6.5 mm,晶体可用长度为 66 mm,压弯机构宽度为 30 mm。驱动力  $F$  由微驱动马达提供<sup>[6,7]</sup>,为了提高机构的精度,严格建立力与形变的耦合关系,该柔性铰链由整块材料经过电解线切割制成。

曲的有效力矩,而是作用在压弯系统中的总力矩。由于底部刻有肋板,晶体的惯量矩约为  $1.03 \text{ mm}^4$ ,相对于压弯机构来说很小。以弧矢半径  $R_s = 0.57 \text{ m}$  为例,通过 ANSYS 分析显示,作用在晶体上的有效力矩只有  $2.93 \text{ N} \cdot \text{mm}$ ,而驱

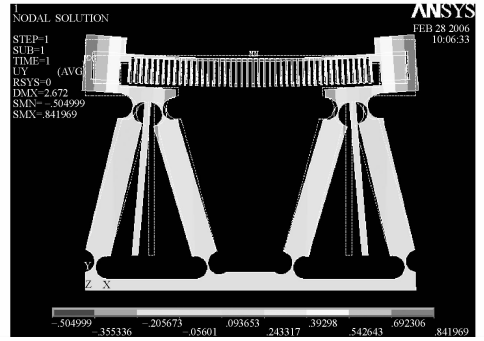


图 5 压弯机构有限元计算模型 ( $F = 8 \text{ N}$ )

Fig. 5 FEM model of bender ( $F = 8 \text{ N}$ )

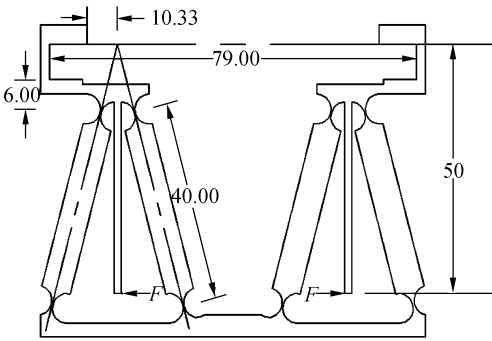


图 4 柔性铰链晶体压弯机构

Fig. 4 Crystal bender with flexible hinges

### 4.2 压弯机构有限元分析

根据上面提供的压弯机构设计图形和结构参数,建立有限元分析计算模型<sup>[8]</sup>。由于结构对称,为简化起见,采用半模分析,即在半边模型的两端施加相等的力  $F = 8 \text{ N}$  (见图 5),分析显示:在晶体的中央区域 ( $14 \text{ mm} < x < 65 \text{ mm}$ ) 曲率为定值,两端因边缘效应各有与晶体厚度相等的长度 (共约 14 mm) 不可用,所以晶体的可用宽度只有 50 mm。图 6 为晶体弧矢曲率沿长度方向的分布,改变驱动力大小,得到图 7 所示的驱动力与晶体的曲率有很好的线性关系,即在 4.1 ~ 12.4 keV 能量扫描时,对应的弧矢半径  $R_s$  变化为  $1.72 \text{ m} \sim 0.57 \text{ m}$ ,驱动力  $F$  的变化为  $2.67 \sim 8 \text{ N}$ 。晶体上最大平均应力约为 8 MPa,远小于 Si (111) 的屈服强度 (约 40 MPa),柔性铰链上的最大平均应力为 0.84 GPa。这里需要注意的是,上面给出的驱动力产生的力矩并不是作用于晶体弯

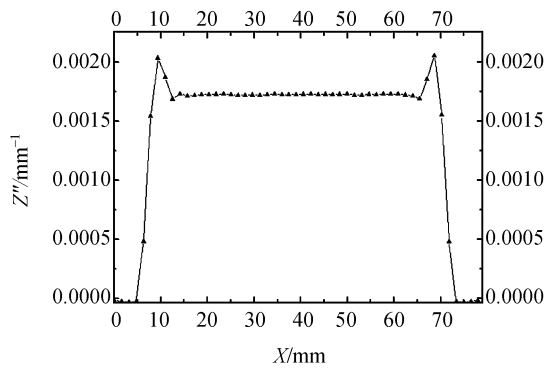


图 6 沿晶体弧矢方向上的曲率分布 ( $F = 8 \text{ N}$ )

Fig. 6 Curvature distribution along crystal length ( $F = 8 \text{ N}$ )

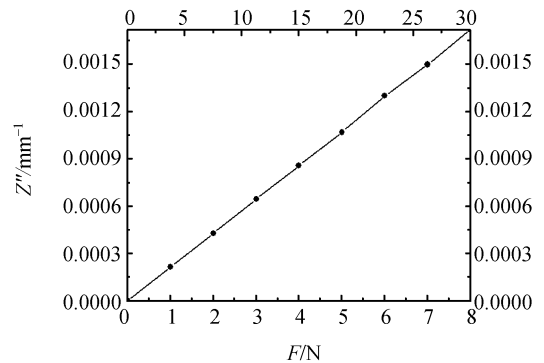


图 7 弧矢曲率随驱动力  $F$  的变化

Fig. 7 Sagittal curvature changed with driving forces

动力  $F$  输入的力矩为  $8 \text{ N} \times 50 \text{ mm} = 400 \text{ N} \cdot \text{mm}$ , 绝大部分力矩被用来克服柔性铰链的阻抗。

## 5 晶体形位误差对入射角的影响

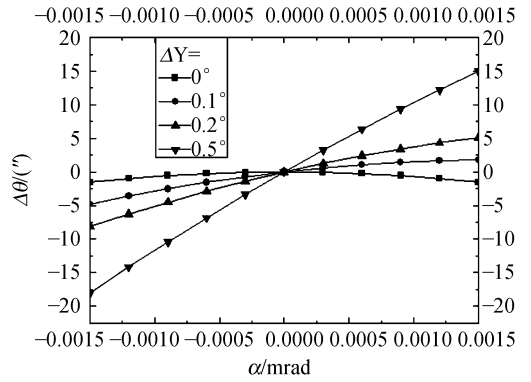
晶体形位误差对入射角的影响主要指: 第二晶体弧矢弯曲和安装定向误差引起的宽束光入射角相对于第一平面晶体的改变, 即  $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1$ , 在引文 5 中已经详细介绍了弧矢弯晶上入射束宽  $\alpha$  对于入射角  $\theta$  的影响, 如果再考虑到弧矢弯晶相对于第一晶体的安装定向误差, 则总的入射角误差可以表示为<sup>[9]</sup>:

$$\Delta\theta = -\left[ \frac{1}{2} \tan \theta_1 \Delta\varphi^2 + \Delta\varphi \Delta\gamma \right] - \left[ \Delta\varphi \left( L_1 \tan \theta_1 / R_s - 1 / \cos \theta_1 \right) + L_1 \Delta\gamma \right] \alpha - \left[ \frac{1}{2} L_1^2 \tan \theta_1 / R_s^2 - L_1 / R_s^2 \right] \alpha^2, \quad (6)$$

式中各参数表示在图 1 中,  $\theta_1$  是第一晶体的入射角,  $\Delta\varphi$  是第二晶体的滚角误差,  $\Delta\gamma$  是第二晶体的摆角误差,  $L_1$  是光源到第二晶体的距离,  $\alpha$  是水平接收角。由于  $\Delta\varphi$  仅引起弧矢柱面对光束的接收位置变化, 只要光束不落入柱面以外, 对入射角改变不会产生影响, 即  $\Delta\varphi = 0$ 。因此上式可简化为

$$\Delta\theta = -L_1 \Delta\gamma \alpha / R_s - \left[ \frac{1}{2} L_1^2 \tan \theta_1 / R_s^2 - L_1 / (R_s \cos \theta_1) \right] \alpha^2, \quad (7)$$

第一项表示摆角引起的误差, 第二项表示聚焦条件引起的误差, 若  $M = 1/3$  时, 第二项为 0。图 8(a) 和图 8(b) 分别给出了  $\theta = 10^\circ$  和  $\theta = 28.8^\circ$  由不同的  $\Delta\gamma$  引起的入射角误差, 显然,  $\Delta\theta$  随着能量  $E$ , 水平接收角  $\alpha$  和摆角误差  $\Delta\gamma$  的增加而增大, 产生了在晶体上满足衍射条件的区域变窄, 光强降低, 尤其在高端表现更为突出。因此在弧矢聚焦双晶单色器中, 当能量  $E$  和缩比  $M$  确定的



(b)  $M = 1 : 4.88, \theta = 28.8^\circ$

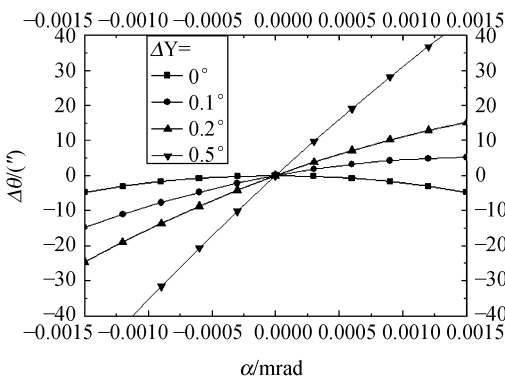
图 8 由  $\Delta\gamma$  引起的入射角误差

Fig. 8 Error of Bragg angle caused by  $\Delta\gamma$

情况下, 影响双晶衍射角宽度的主要因素有两个, 一是水平接收角  $\alpha$ , 二是弧矢弯曲晶体的定向摆角误差  $\Delta\gamma$ 。

## 6 结 论

本文根据 XAFS 实验站需要更高的光子通量和光子密度的要求, 采用弧矢聚焦双晶单色器替代原有的双平晶单色器, 介绍了利用柔性铰链压弯机构对弧矢聚焦双晶单色器中第二晶体进行动态压弯的工作原理。通过分析计算, 确定了弧矢聚焦双晶单色器的光学结构, 将单色器的水平接收角从 1 mrad 拓宽到 3 mrad, 样品上光斑的水平尺寸由 12.5 mm 减小到 2.5 mm, 提高了光子通量和样品上的光子密度; 为减小第二晶体因压弯产生的鞍型形变, 在第二晶体底部刻上肋板并优化其几何参数, 由此得到鞍型形变造成的光束入射角误差仅为  $2.2 \mu\text{rad}$  左右, 小于晶体本征衍射角宽度; 用有限元方法模拟压弯机构受力变形情况, 得到在能量 4.1~12.4 keV, 晶体弧矢半径 0.57~1.72 m, 驱动力为 8~2.67 N 的对应关系; 使用弹性模量较小的铍青铜作为压弯机构的材料, 得到晶体和柔性铰链上的最大平均应力分别为 8 MPa 和 0.84 GPa, 均小于其屈服强度; 综合分析计算了弧矢弯晶在制作和安装过程中的形位误差、定向精度在不同能量和不同水平接收角下对 Bragg 角的影响。以上结果表明: 该弧矢聚焦单色器的弧矢弯晶结构和材料选用方案完全可以达到设计指标, 在提高光子通量和光子密度的



(a)  $M = 1 : 4.88, \theta = 10^\circ$

同时又能满足 XAFS 测量过程中频繁快速能量扫描的要求。

### 参考文献:

- [1] 汤琦,马健康,周泗忠,等. 弧矢聚焦双晶单色器设计[J]. 光学精密工程,2002,10(4):410-413.  
TANG Q, MA J K, ZHOU S ZH, *et al.*. Design of a sagittally focusing double-crystal monochromator in synchrotron radiation[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2002, 10(4): 410-413. (in Chinese)
- [2] MARINE P. Conception, fabrication and test of a bender for X-ray focusing crystal[R]. *Grenoble: ESRF*, 1994.
- [3] 傅翮,周仁魁,周泗忠,等. 同步辐射光束线中柔性铰链的研究[J]. 光学精密工程,2001,9(1):67-70.  
FU X, ZHOU R K, ZHOU S ZH, *et al.*. Flexure hinge in beamline of synchrotron radiation[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2001, 9(1): 67-70. (in Chinese)
- [4] ZHANG L, UNSTACHE R. Design optimization of a flexural hinge-based bender for X-ray optics[J]. *J. Synchrotron Radiat.*, 1998, 5: 804-807.
- [5] HU J SH, WU X. Manufacturing and testing of X-ray imaging component with high precision[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(5): 622-623.
- [6] 赵宏伟,刘建芳,华顺明,等. 压电型步进精密旋转驱动器[J]. 光学精密工程,2005,13(3):305-310.  
ZHAO H W, LIU J F, HUA SH M, *et al.*. Piezoelectric-type stepping precision rotary actuator[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(3): 305-310. (in Chinese)
- [7] 吴建华,褚家如. 一种压电驱动微操作器及其释放位置精度分析[J]. 光学精密工程,2005,13(3):283-285.  
WU J H, CHU J R. Piezoelectric driven micromanipulator and its positioning accuracy analysis[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(3): 283-285. (in Chinese)
- [8] 柳晖,高雪官. 同步辐射单色器冷却压弯机构[J]. 光学精密工程,2004,12(6):611-612.  
LIU H, GAO X G. Monochromator cooling bender in synchrotron radiation[J]. *Opt. precision Eng.*, 2004, 12(6): 611-612. (in Chinese)
- [9] KOYAMA A, NOMURA M. Improvement of a sagittally focusing double-crystal monochromator[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1991, 63(1): 917-918.

**作者简介:**凤良杰(1982—),男,安徽泗县人,现在中国科技大学国家同步辐射实验室攻读博士学位,主要研究方向为精密机械设计,同步辐射光束线设备研制。E-mail: phoenixf@mail.ustc.edu.cn