

文章编号 1004-924X(2008)10-1880-06

# 中子衍射应力谱仪垂直聚焦单色器的优化设计

王晓影, 李 建, 谢超美, 刘 荣

(中国工程物理研究院 核物理与化学研究所, 四川 绵阳 621900)

**摘要:**为提高应力谱仪样品处的中子注量率,对垂直聚焦单色器进行了优化设计。应用蒙特卡罗模拟程序 MCSTAS 对中子衍射应力谱仪的垂直聚焦 Ge(511)单色器进行优化计算,得到了垂直聚焦单色器的高度与单晶片之间的倾角等参数的最佳值。然后,对比分析了在垂直聚焦单色器与平板单色器两种情况下样品处的中子注量率。最后,讨论了单色器起飞角对谱仪分辨率的影响。计算结果表明:单色器尺寸为 50 mm×150 mm;垂直单色器在样品台中心位置的中子注入量是平板单色器的4.99倍,表明利用垂直单色器可以显著提高应力谱仪样品处的中子注量率。

**关键词:**中子衍射;应力谱仪;单色器;垂直聚焦;中子注量率

中图分类号:TL817.3 文献标识码:A

## Optimal simulation of vertical monochromator of neutron diffraction residual stress instrument

WANG Xiao-ying, LI Jian, XIE Chao-mei, LIU Rong

(*Institute of Nuclear Physics and Chemistry,  
China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

**Abstract:** In order to increase the neutron flux at the sample position in a residual stress instrument, the optimal design of vertical monochromator was researched. An optimization simulation was performed for the vertical focusing monochromator Ge (511) of neutron diffraction residual stress instrument, and several optimized parameters, such as the height of the monochromator and the angle between two adjacent crystals were obtained. Then, the neutron fluxes at the sample positions in vertical and flat monochromators were analyzed contrastively. Finally, the influence of the take-off angle of monochromator on instrument resolution was discussed. The calculation results indicate that optimized monochromator dimension is 50 mm×150 mm, and the neutron flux of the vertical monochromator is 4.99 times as many as that of flat one. These results show that proposed vertical monochromator can improve the neutron flux considerably at sample position in residual stress instrument.

**Key words:** neutron diffraction; residual stress instrument; monochromator; vertical focusing; neutron intensity

收稿日期:2008-01-25;修订日期:2008-03-17.

基金项目:中国工程物理研究院科学技术基金课题资助项目(No. 20060210)

## 1 引言

20 世纪 70 年代以来,聚焦单色器技术在中子散射谱仪中得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。对于中子衍射应力谱仪而言,测量的标样体积很小,一般只有几个立方毫米,产生的衍射信号非常弱,因此要求样品处的入射中子束强度尽可能高。然而,为了测到样品中产生的应变,中子衍射应力谱仪同时要求很高的分辨率,一般情况下,应力谱仪的分辨率  $\Delta d/d$  为  $10^{-3}$  量级。由于分辨率与衍射强度是一对矛盾,为了弥补提高分辨率所造成的强度损失,应尽量提高入射到样品上的中子注量率,因此国际上的中子衍射应力谱仪普遍采用聚焦单色器技术。比如法国劳厄-朗之万研究所新建设的中子衍射应力谱仪 SALSA<sup>[4]</sup> 采用了 Si 单晶聚焦单色器,澳大利亚布拉格研究所的中子应力谱仪 KOWARI<sup>[5]</sup> 将同时采用 Si 与 Ge 单晶聚焦单色器。但是直到目前为止,聚焦单色器仍属于非标产品,需要根据所用谱仪的特点专门设计。近几年,为了优化工程设计以节省工程实施所需的时间与资源,越来越多的专家与工程设计人员先行对各种仪器乃至具体部件的模型进行模拟计算<sup>[6-7]</sup>。本文用蒙特卡罗方法,对中子衍射应力谱仪模型中的垂直聚焦单色器进行了模拟与优化研究,并且与使用平板单色器的情况进行了比较,最后计算了对谱仪分辨率产生的影响。

模拟使用的程序是丹麦 RISØ 国家实验室开发的国际各大中子散射实验室通用的中子散射谱仪模拟计算软件 MCSTAS<sup>[8]</sup>。应用此软件,通过对中子源发出的每一个抽样中子在经过谱仪各部件(如导管、准直器、单色器、狭缝等)的输运过程进行追踪,实现对中子散射谱仪的模拟。它包含了常见部件的模拟子程序库,只要将各部件按需求进行几何排列,并且输入各部件的物理与几何参数,就构成了一台虚拟的谱仪,通过在感兴趣的位置放置虚拟探测器就可以探测到此处的中子分布等情况,这一特点使得模拟工作方便、快捷、经济并且可以实现谱仪设计方案的优化设计、实验条件的优化选择等。

## 2 计算模型

一台中子衍射应力测量谱仪主要包括单色器系统、准直器、样品台和探测器系统等部件。中子束从水平孔道引出经导管或第一准直器准直后入射到单色器上,单色器将满足布拉格条件的单色中子反射出来,经第二准直器入射到样品上,样品产生的衍射束经第三准直器准直后被探测器记录。装置示意图如图 1。在本计算模型中使用垂直聚焦单色器,焦距可调;第二准直器位于单色器屏蔽大鼓内,样品台到单色器的距离为 1.5~1.8 m 可变,为减少测量时间,提高测量效率,探测器使用二维位置灵敏探测器,到样品台的距离为 0.5~1.5 m 之间可调,以适应不同强度和分辨的需要。模拟计算中假设水平孔道入口处中子注量率为  $2 \times 10^{14}$  n/cm<sup>2</sup>·s,能谱服从 Maxwell 分布,中子温度为 320 K,应力谱仪就以此处的热中子注量率为源参数进行模拟计算。

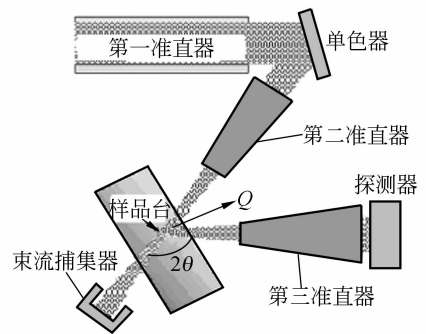


图 1 中子衍射应力谱仪装置示意图

Fig. 1 Sketch of neutron diffraction residual stress instrument

本文的模拟计算只考察垂直聚焦单色器参数变化对谱仪性能的影响,因此在模拟计算时固定第一准直器的水平发散度为  $30'$ ,第二准直器的水平发散度为  $20'$ ;单色器镶嵌角在单色器晶体确定情况下也是不可变的,这里取  $20'$ ;设定的追踪粒子为  $10^9$  个。

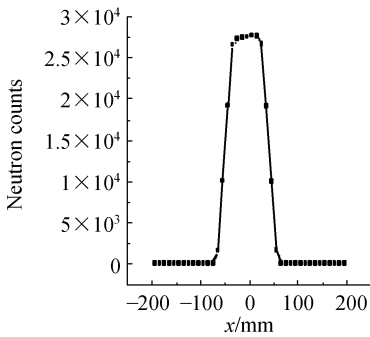
## 3 单色器优化计算

目前用于制作单色器的材料主要有 Ge、Cu、

Si、HOPG 等,但 Ge 具有其独到的优点,比如具有较高的反射率和德拜温度、较低的吸收截面和非相干散射截面、可选取适当晶面以消除次级污染、熔点相对较低故易于加工、并且用不是很高的价格就可以获得高品质的大体积单晶等,因此本文在此也选用 Ge 单晶,模拟计算选择(511)面,镶嵌角为 20'。

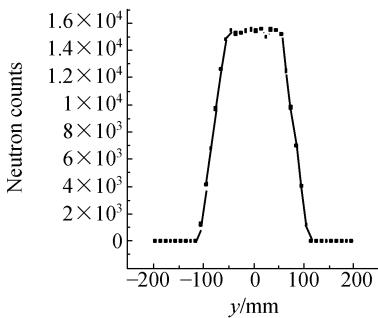
### 3.1 单色器尺寸的选取

要确定单色器的尺寸,首先在单色器处放置一个大的二维探测器,以探测到单色器位置中子的分布情况。模拟计算得到中子在探测器上水平分布和垂直分布如图 2。根据探测器上的中子分布情况,确定了单色器的宽度和高度。



(a) 水平分布

(a) Horizontal distribution



(b) 垂直分布

(b) Vertical distribution

图 2 单色器位置的中子分布情况

Fig. 2 Neutron distribution at monochromator position

从图中可以看出,在水平方向,大部分中子均匀分布在 -25 ~ 25 mm 内;在垂直方向上,大部分中子均匀分布在 -75 ~ 75 mm 内。考虑到单

色器晶体非常昂贵,因此需要优化设计单色器尺寸。应力测量时,被探测的体积元往往很小只有几个立方毫米,因此在样品台处并不需要很大尺寸的中子束流。这样,也就不需要将单色器的尺寸设计得能够截住全部中子束流,具体单色器宽度和高度的选取可以根据图 2 和图 3,单色器在水平方向上设置为 50 mm,垂直方向上设置为 150 mm,那么此时中子的利用率为 83%。每个单晶条为 50 mm(L)×10 mm(H),在垂直方向上排列 15 片,这样可以接受大部分中子。

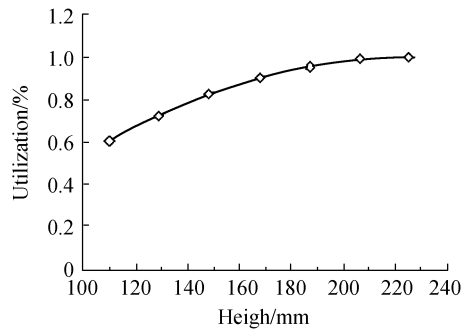


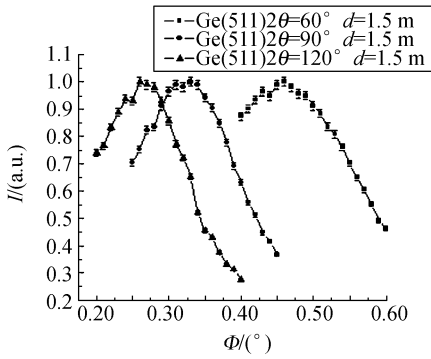
图 3 不同单色器高度对中子的利用率

Fig. 3 Utilization for neutrons along vertical direction by monochromator with different heights

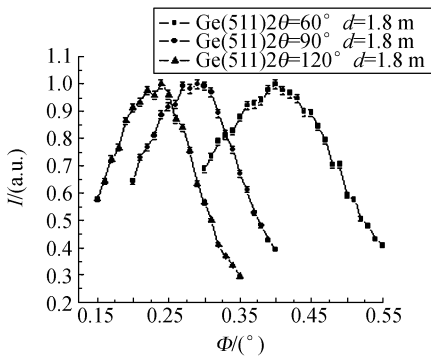
### 3.2 单色器聚焦倾角的计算

曲率半径是单色器的一个重要指标,也是调节单色器使中子聚焦到样品上的一个重要的标准。下面通过模拟计算方法找到单色器相邻晶片的最佳倾角,即在样品上获得最大中子注量率时单色器的曲率半径。首先固定单色器到样品台的距离,在样品台处放上虚拟探测器,通过一点点改变单色器相邻晶片的倾角,考察样品台的中心位置上虚拟探测器的中子注量率的变化情况,这样可以找到单色器聚焦的优化曲率半径。这里主要计算了单色器到样品台距离为 1.5 m 与 1.8 m 两种情况,如图 4 所示。

从图 4 可见,逐步调节单色器每一片晶片的倾角,入射到样品上的中子注量率的变化曲线会出现一个峰值,这样就可以找到在样品上获得最大注量率时的单色器的聚焦曲率半径。总结以上模拟计算结果,如表 1。



(a)  $d=1.5\text{ m}$



(b)  $d=1.8\text{ m}$

图 4 样品处中子强度随单晶片倾角的变化

Fig. 4 Neutron intensities versus tilting angles of single crystal flats at sample position

表 1 样品上获得最大中子注量率的单色器晶片间倾角模拟计算结果  
Tab.1 Simulation results of for tilting angles of single crystal flats

单色器-样品台的距离	单色器 Ge(511) 起飞角	相邻晶片间最佳倾角	单色器最佳曲率半径
1.5 m	60°	0.46°	1 397.5 mm
	90°	0.33°	1 945.8 mm
	120°	0.26°	2 472.5 mm
1.8 m	60°	0.40°	1 624.5 mm
	90°	0.29°	2 217.8 mm
	120°	0.24°	2 696.5 mm

从表 1 计算结果可以看出,随着单色器与样品台的距离变化,相同的起飞角相邻晶片的最佳倾角值也是变化的,即单色器的曲率半径是变化的。因此,只要单色器与样品台的距离改变了,就需要重新调节单色器系统。在实际操作中,为了

节省调节时间,可以用 MCSTAS 程序先进行模拟计算,得到样品上获得最大中子注量率时相邻晶片间的倾角值,再在此值附近范围内进行晶片倾角的调节以缩短调节时间。

### 4 样品处中子注量率的增益

样品处中子注量率是谱仪的主要指标之一,尤其对于应力谱仪,由于标样体积只有几个,因此对样品台处中子注量率的要求比较高。使用聚焦单色器的主要目的即希望在样品台处得到比较强的中子注量率。为了直观地反应出聚焦单色器的使用对样品台处中子强度的影响,分别针对平板单色器与垂直聚焦单色器两种条件下的样品处的中子注量率进行了模拟计算。单色器到样品台的距离为 1.8 m,单色器起飞角为 90°时,观察样品台中心入射到样品上的 100 mm<sup>2</sup> 范围内中子强度的增益,如图 5。模拟计算结果显示使用垂直聚焦单色器在样品台中心位置中子注量率可以达到  $1.80 \times 10^6$  Neutron/cm<sup>2</sup> · s,是使用平板单色器时注量率  $3.61 \times 10^5$  Neutron/cm<sup>2</sup> · s 的 4.99 倍。

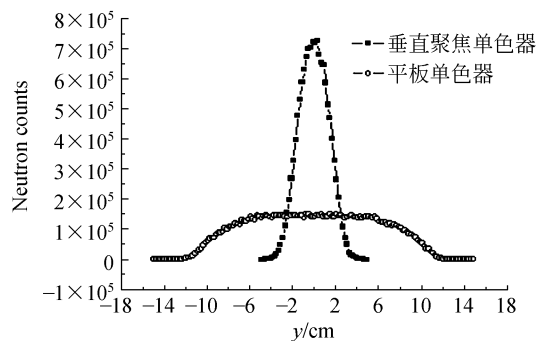


图 5 样品上垂直方向上中子的分布

Fig. 5 Neutron distributions along vertical direction at sample position

### 5 对谱仪分辨率的影响

决定谱仪分辨率的有几个参数:第一、第二和第三准直器的发散度  $\alpha_1$ 、 $\alpha_2$  和  $\alpha_3$ ,单色器的镶

嵌度  $\beta$  和所用反射面的起飞角  $2\theta_M$ 。而单色器采用垂直聚焦并不影响应力谱仪的分辨率。一般情

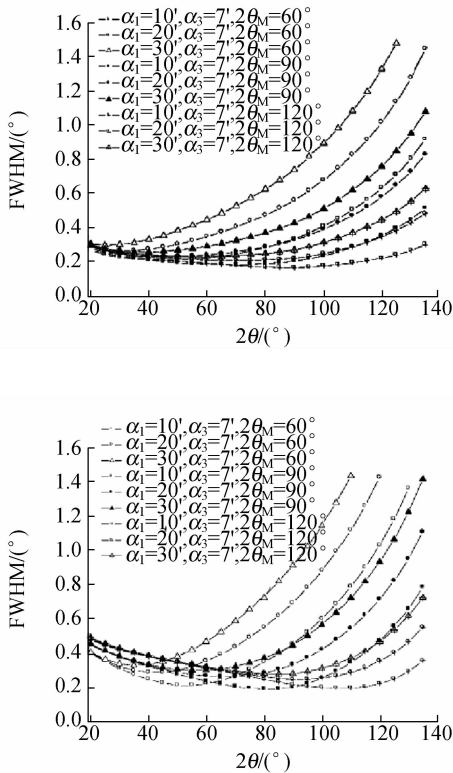


图 6 准直器和单色器不同配置时的谱仪分辨率曲线<sup>[10]</sup>  
Fig. 6 Spectral resolution curves under different settings of collimator and monochromator<sup>[10]</sup>

况下中子应变扫描技术的标准分辨率为  $\epsilon = 2 \times 10^{-3}$ , 即  $\delta\theta$ 。通常用衍射峰的半高宽来表示谱仪的分辨率的大小, 在  $2\theta$  处峰值的半宽度可以根据 Cagliotti<sup>[9]</sup> 等人提出的公式来计算, 计算中单色器的镶嵌角度  $\beta$  为  $20'$ , 第三准直器发散度取常用值  $7'$ 。图 6 给出了不同单色器起飞角的谱仪分辨率曲线。从图 6 可以看出单色器起飞角越大, 谱仪的分辨率越好。因此, 在应力谱仪单色器设计中要尽量取较大的起飞角, 这样可以获得较好的谱仪分辨率。

## 6 结 论

应用蒙特卡罗程序—MCSTAS 对中子衍射应力测量谱仪的单色器进行了模拟计算, 计算结果表明, 在样品台与单色器的距离可变条件下, 若需在样品台获得较好的中子注量率, 要优化调节单色器晶片间的倾角。与此同时, 还可以看到垂直聚焦单色器的使用可以大幅度提高样品处中子的注量率, 在样品台中心位置  $100 \text{ mm}^2$  范围内, 可以提高到 5 倍之多; 而且单色器选择大的起飞角, 谱仪可以获得很好的分辨率。因此在设计中子衍射应力测量谱仪时, 单色器晶体尽量选择较大的起飞角, 并且可以采用垂直聚焦技术, 这样既可以获得好的分辨率也可以提高应力谱仪样品处的中子注量率。

## 参考文献:

- [1] AXE J D, CHENG S, COX D E, *et al.*. Composite germanium monochromators for high resolution neutron powder diffraction applications [J]. *Journal of Neutron Research*, 1994, 2(3): 85-94.
  - [2] LECHNER R E, WALLPACH R V, GRAF H A, *et al.*. A monochromator with variable horizontal and vertical curvatures for focusing in real and reciprocal space [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 1994, 338: 65-70.
  - [3] NUNES A C, SHIRANE G. Vertically bent pyrolytic graphite crystals applied to triple-axis neutron spectrometry [J]. *Nuclear Instruments and Methods*, 1971, 95: 445-452.
  - [4] THILO P, GIOVANNI B, PHILIP J. SALSA—A new instrument for strain imaging in engineering materials and components [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2006, 437: 139-144.
  - [5] BRULE A, KIRSTEIN O. Residual stress diffractometer KOWARI at the Australian research reactor OPAL: Status of the project [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2006, 2(385-386): 1040-1042.
  - [6] 陈华才, 吕进, 陈星旦, 等. 基于径向基函数网络的茶多酚总儿茶素近红外光谱检测模型的研究 [J]. *光学精密工程*, 2006, 14(1): 58-62.
- CHEN H C, LV J, CHEN X D, *et al.*. Near infrared spectroscopic model for determinating total catechins in tea polyphenol powder based on radical basis function network [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(1): 58-62. (in Chinese)

- [7] 侯溪,伍凡,杨力,等. 环形子孔径拼接检测大口径非球面镜的规划模型及分析[J]. 光学精密工程,2006,14(2):207-212.  
HOU X, WU F, YANG L, *et al.*. Layout model and analysis of annular subaperture stitching technique for testing large aspheric mirror [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006,14(2):207-212. (in Chinese)
- [8] LEFMANN K, MCSTAS N K. A general software package for neutron ray-tracing simulations [J]. *Neutron News*, 1999,10(3):20-23.
- [9] CAGLIOTI G, PAOLETTI A, RICCI F. Choice of collimators for a crystal spectrometer for neutron diffraction [J]. *Nuclear Instruments and Methods*, 1958, 3:223-228.
- [10] 郭立平,李际周. CARR 上的应力测量中子衍射谱仪概念设计和模拟研究[J]. 核技术,2005,28(3):231-235.  
GU L P, LI J ZH. Conceptual design and simulation on neutron diffractometer for stress measurement at CARR [J]. *Nuclear Technology*, 2005,28(3):231-235. (in Chinese)

作者简介:王晓影(1979—),女,辽宁沈阳人,助理研究员,工程师,主要从事中子散射研究。E-mail: xiaoying2590@yahoo.com.cn

## ● 下期预告

# 投影光刻离轴照明用衍射光学元件设计

张 巍, 巩 岩

(中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033)

离轴照明作为一种重要的分辨率增强技术被广泛的应用于投影光刻系统。使用衍射光学元件(DOE)作为光刻照明系统的光束整形器件,能够在保持较高照明效率的基础上精确控制离轴照明光束的形状及光强分布。利用基于傅立叶变换的分步迭代方法进行了该类衍射光学元件的优化设计。DOE采用了多台阶位相结构,设计所得8台阶DOE设计结果分别实现了偶极、四极、环形及Bulls-Eye等照明方式,其照明效率都达到了80%以上,与目标光强分布的均方根偏差均 $<7\%$ 。