

文章编号 1004-924X(2009)12-2983-07

中子反射谱仪的闸门与会聚导管组合设计

李新喜,王 燕,黄朝强,陈 波

(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:为提高水平散射几何中子反射谱仪的前端束流特性,针对前端闸门与会聚中子导管的组合设计进行了优化计算。根据闸门通道截面、会聚导管入、出口截面及相应内表面超镜因子不同分成多组,采用数值方法对多个组合设计进行优化计算。结合水平散射几何中子反射谱仪的客观需求进行比较分析,选取比较理想的组合。计算结果表明:会聚导管的最佳组合是采用水平面会聚,垂直面不会聚,而闸门内表面超镜因子选为 2,会聚导管水平面超镜因子为 3,垂直面超镜因子为 2。通过多组比较分析,获得了水平散射几何中子反射谱仪的前端闸门与会聚导管的相关物理参数的优化组合,为谱仪的概念设计奠定了基础。

关键词:中子反射谱仪;闸门;会聚导管;超镜因子;组合优化

中图分类号:TL817.9 **文献标识码:**A

Optimized combination of shutters and focus neutron guides for neutron reflectometers

LI Xin-xi, WANG Yan, HUANG Chao-qiang, CHEN Bo

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

Abstract: To improve the performance of the front beam of a neutron scattering reflectometer with the horizontal geometry, the optimized combination of a beam shutter and a focus neutron guide is obtained by a numerical calculation method. According to the channel sections of the shutter and the entrance and exit of the neutron guide, and their supermirror indexes, the combination design model is divided into different groups. Based on the requirements of the neutron scattering reflectometer with the horizontal geometry, the optimized combination design model is chosen from the groups by a numerical calculation method. The result shows that the optimized design of focusing neutron guide is that one which can only focus on the horizontal walls of the guide and its supermirror indexes are 2, 3, 2 for the shutter, and horizontal and vertical walls, respectively. The optimal parameter combinations of the shutter and the focus guide are selected after analysis of many groups of combinations, which lay a theoretical foundation for the conceptual design of neutron reflectometers.

Key words: neutron reflectometer; shutter; focus neutron guide; supermirror index; combination and optimization

收稿日期:2008-11-17;修订日期:2008-12-31.

基金项目:中国工程物理研究院科学技术发展基金资助项目(No. 2007B02002)

1 引言

近年来随着材料的发展,一大批中子反射谱仪相继问世^[1-6]。中子反射谱仪根据散射几何的不同,分为水平散射几何和垂直散射几何两种模式。垂直散射几何的中子反射谱仪其样品表面是水平的,对于样品材料没有限制,除固体表面外,还可用于液体-液体、固体-液体、液体-气体表面的样品材料研究,但其设计对于样品台防震要求比较高,造价也比较昂贵。水平散射几何样品表面是垂直的,相应的技术要求比较低。因此,对于没有液体表面样品要求的中子反射谱仪,通常都采取水平散射几何样品台设计。设计水平散射几何的中子反射谱仪位于最前端的中子导管时,希望尽可能地减少中子束流运输的损失以及水平面内的中子束流发散度,提高样品处的中子束流强度,缩短实验时间及拓宽可供穿透样品范围,这表明中子导管的设计应尽可能地提高中子束流传输效率。

在提高中子束流强度问题上许多科技工作者采取了诸多办法,常用的是利用会聚型中子导管会聚中子束流。但中子束流强度的提高与中子束流发散的降低是一组矛盾,也就是说中子会聚的同时会增大发散,中子会聚虽对提高中子束流强度有一定的作用,但中子发散同样会对谱仪分辨率产生影响。因此,为提高中子散射谱仪的性能,根据客观情况分析中子导管的运输特性对中子散射谱仪的选择和优化设计十分重要。对于中子导管运输特性的计算,历史上经过了长期的发展^[7-9]。常用的中子运输模拟计算程序有 Mccstas^[10]、Vitess^[11]以及数值计算方法^[12]。闸门在中子反射谱仪的设计中位于最前端,主要起中子束流的关闭作用。在中子散射谱仪的设计中,通常还有中子束流塑形的作用。不同的闸门与中子会聚导管的组合,会形成不同特性的中子束流。数值计算方法是一种能够精确计算中子运输轨迹的计算软件,对一些非完美中子导管更为精确有效^[12]。本文采用数值计算方法,重点考察不同组合的中子束流运输特性,对水平散射几何的中子反射谱仪的前端闸门与会聚中子导管的组合的优化设计具有指导意义。

2 数值方法基本原理

数值计算方法^[12]采用解析公式,可求解出对应波长、位置以及入射角的透射系数,然后通过积分式求得通道出口的输出谱。

求解输出谱的积分表达式为:

$$\Phi = \int_0^{\infty} T(\lambda) F_M(\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

式中, $T(\lambda)$ 是中子导管的透射系数, $F_M(\lambda)$ 是输入谱。对于矩形中子导管来说, $T(\lambda)$ 等于水平 x 方向与垂直 y 方向透射系数相乘,再除以入射发散 4π , 即:

$$T(\lambda) = \frac{1}{4\pi} H(\lambda) \cdot V(\lambda), \quad (2)$$

式中, $H(\lambda)$ 和 $V(\lambda)$ 计算公式分别如下:

$$H(\lambda) = \frac{1}{\omega} \int_0^{\omega} \int_{\theta_{\min}(x)}^{\theta_{\max}(x)} t(\theta, x, \lambda) dx d\theta, \quad (3)$$

式中, ω 为导管入口宽度, $\theta_{\min}(x) \leq \theta \leq \theta_{\max}(x)$, $0 \leq x \leq \omega$;

$$V(\lambda) = \frac{1}{h} \int_0^h \int_{\theta_{\min}(y)}^{\theta_{\max}(y)} t(\theta, y, \lambda) dy d\theta, \quad (4)$$

式中, h 为导管入口高度, $\theta_{\min}(y) \leq \theta \leq \theta_{\max}(y)$, $0 \leq y \leq h$,

$$t(\theta_i, x_j, \lambda_m) = \begin{cases} 1, N=0 \\ \Pi R\left(\frac{4\pi\alpha_n}{\lambda_m}\right), N>0 \end{cases}. \quad (5)$$

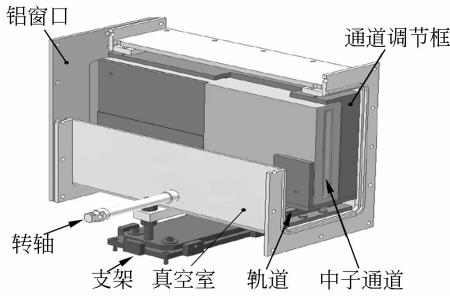
每一个分波长 λ_m 的中子到达出口的可能性为 $t(\theta_i, x_j, \lambda_m)$, R 为相应波长的反射率。 N 为中子在导管内的反射次数, α_n 为第 n 次反射时的掠入射角。

通过程序计算可获得各个发散角对应的中子计数,而采用高斯拟合可获得相应出口的发散度。

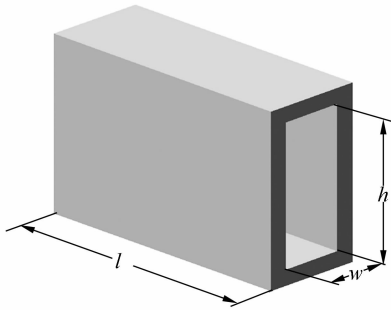
3 闸门与会聚导管的组合结构模型

3.1 闸门结构

图 1(a)和(b)分别给出了前端中子闸门的剖面和内中子通道的结构示意图,图 1(b)的内表面为中子超镜,相应的通道物理参数分别为长度 l , 宽度 ω 和高度 h 。



(a) 闸门
(a) Shutter



(b) 内部中子通道
(b) Inner channels

图 1 结构示意图
Fig. 1 Schematic map

3.2 会聚中子导管结构

会聚中子导管的结构见图 2。会聚中子导管为一个入口截面大,出口截面小的会聚型中子导管。比较常用的为单通道的会聚中子导管,该导管根据中子散射谱仪设计的需要选取,起提高中子束流强度的作用。不同的客观物理条件以及谱仪需求,对中子运输后的中子束流特性需求不一样,相应的对会聚导管以及其相匹配的运输设备的物理参数组合也不相同。

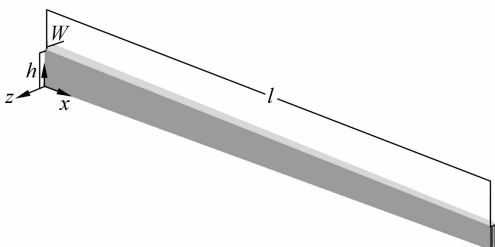


图 2 会聚导管的结构示意图
Fig. 2 Schematic map of focus neutron guide

4 计算

4.1 双会聚时的组合计算

双会聚指的是会聚导管水平面和垂直面均有会聚作用,其相应的输入物理参数见表 1。会聚由入口截面为 $200\text{ mm} \times 30\text{ mm}$ 到出口截面为 $120\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ 。

表 1 双会聚导管的物理参数

Tab. 1 Input parameters of double focus neutron guide

长度 /mm	入口高 /mm	入口宽 /mm	出口高 /mm	出口宽 /mm
7 000	200	30	120	10

闸门入出口截面相同,大小与会聚导管的入口截面相同,长度为 300 mm 。闸门关闭时可以将中子基本上完全吸收或散射掉,闸门通道处于打开状态时与会聚导管一起进行中子束流的传输及塑形。

表 2 给出了 5 组不同闸门与导管组合模型的内通道镜面超镜因子输入参数,计算选用了闸门通道内表面为完全吸收的材料和具有一定超镜因子时的组合设计。针对会聚中子导管,考虑内通道 4 个内表面均有会聚作用,将会聚导管内表面的超镜因子全部选为能够更好提高中子束流强度的大超镜因子 3。

表 2 双会聚时的不同组合模型

Tab. 2 Different combination design models of double focus guides

组合	超镜因子(m)			
	闸门垂 直面	闸门水 平面	会聚导管 垂直面	会聚导管 水平面
1 [#]	0	0	3	3
2 [#]	0	1.5	3	3
3 [#]	0	3	3	3
4 [#]	2	2	3	3
5 [#]	3	3	3	3

图 3 绘出了不同组合的输出中子束流的强度及水平方向发散度。图 3(a)给出的是不同组合时输出中子束流强度的结果比较图。由图中结果可以看出,第 4[#] 和第 5[#] 组输出中子束流强度

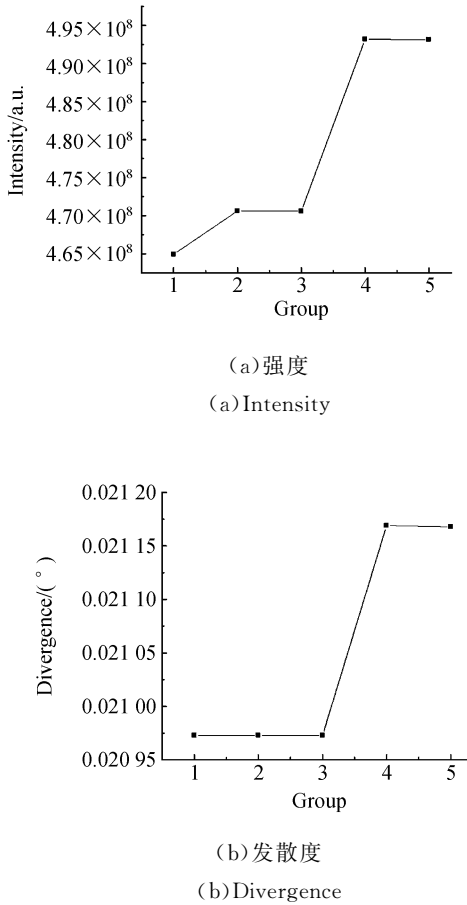


图 3 双会聚时不同组合的输出中子束流

Fig. 3 Output neutron flow of different combination designs of double focus guide

最大。对 4[#]组和 5[#]组进行了比较,由于第 5[#]组使用超镜因子比较大,在效果基本一致的情况下,考虑到经费的支出,认为第 4[#]组为最佳组合设计。由图 3(b)可以看出,输出中子束流的水平方向发散度图形和图 3(a)中的图形基本上相似,束流强度大的组合,相对应的输出中子束流的水平方向发散度也大。但从整体上来看,发散增大的幅度不大。

为了能更直观地了解各个组合设计的中子束流输运特性,本文假设输入和输出的中子束流强度及中子束流发散度分别为 I_i 、 div_i 和 I_o 、 div_o 。将组合设计输出的中子束流强度 I_o 与发散度 div_o 的比值称作有效束流比 Er ,推导过程如下:

$$Er = \frac{I_o / I_i}{\text{div}_o / \text{div}_i}, \quad (6)$$

式(6)可变为:

$$Er = \frac{I_o}{\text{div}_o} \cdot \frac{\text{div}_i}{I_i}, \quad (7)$$

式(7)中后一项 div_i / I_i 对于固定输入中子束流来说是常数。因此,对 Er 起主要作用的是前一项 I_o / div_o 。假定固定输入中子束流的 div_i / I_i 为单位常数 1,则不同组合的输出有效比 Er 变化曲线见图 4。

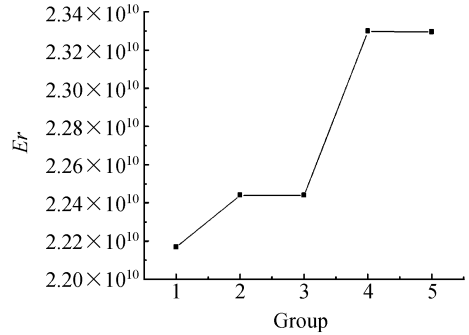


图 4 双会聚时不同组合的输出中子束流有效比
Fig. 4 Output neutron efficiency ratios of different combination designs of double focus guide

水平散射几何中子反射谱仪的整体分辨率与入射到样品上的掠入射中子束流水平方向的分散度存在如下关系^[13-14]:

$$\left(\frac{\Delta q}{q}\right)^2 = \left(\frac{\Delta \theta}{\theta}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \lambda}{\lambda}\right)^2, \quad (8)$$

式中, $\Delta q / q$ 为谱仪分辨率, $\Delta \theta$ 为中子束流发散度, θ 为掠入射角, $\Delta \lambda / \lambda$ 为波长分辨率。

由式(8)可知,束流发散度直接影响着整套谱仪的分辨率。通常情况下,在镜反射实验测量中,对于多数固体材料,由于中子达到全反射时掠入射角 θ 比较小,这就要求束流发散更小才能得到较高的谱仪分辨率。

由图 3 可以看出,组合设计的输出中子束流强度较大的相应的发散度也大。水平散射几何反射谱仪的设计希望能得到较小水平方向发散度同时又有尽可能大的输出中子束流强度。图 4 给出了不同组合时的输出中子束流的有效比 Er ,由图中明显可以看出,第 4[#]组和 5[#]组组合设计为最佳组,考虑到经济因素,在双会聚时,第 4[#]组为最佳设计组合。

4.2 单会聚时的组合计算

考虑到水平散射几何中子反射谱仪在水平方向上要求发散度不能太高,会聚导管仅有水平面会聚时,在空间上实际是仅对垂直方向上的中子束流进行了会聚,水平方向不会聚,以期保持水平发散度没有大的改变,同时又能提高中子束流强

度,把这种单对垂直面有会聚作用的导管称做单会聚中子导管,输入物理参数见表 3。

表 3 单会聚导管的物理参数

Tab. 3 Input parameters of single focus neutron guide

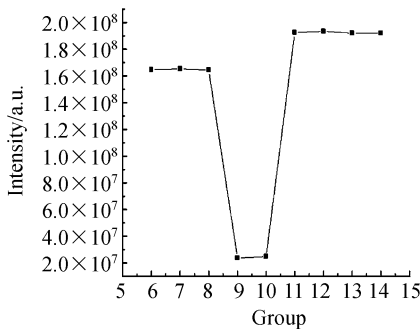
长度 /mm	入口高 /mm	入口宽 /mm	出口高 /mm	出口宽 /mm
7 000	200	10	120	10

表 4 单会聚时的不同组合模型

Tab. 4 Different combination design models of single focus guide

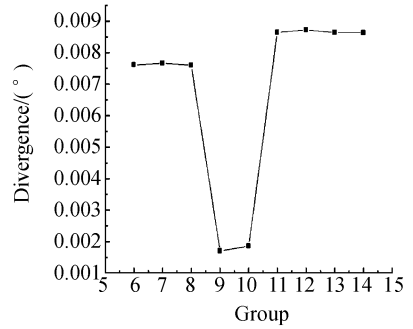
组合	超镜因子(m)			
	闸门垂 直面	闸门水 平面	会聚导管 垂直面	会聚导管 水平面
6 [#]	0	0	1.5	3
7 [#]	0	0	2	3
8 [#]	0	0	3	3
9 [#]	0	3	0	3
10 [#]	2	2	0	3
11 [#]	2	2	1.5	3
12 [#]	2	2	2	3
13 [#]	2	2	3	3
14 [#]	3	3	3	3

闸门的设计和后端的会聚导管相匹配,即通道截面与会聚导管的入口截面相同。表 4 给出了单会聚时闸门与会聚导管不同组合设计模型的内表面超镜因子组合输入参数。与双会聚情况不同的是由于单会聚导管内通道垂直镜面没有会聚作用,为了考察组合设计对水平方向上输出中子束流的发散度,针对会聚导管垂直面,可选用吸收材料以及小超镜因子。



(a)强度

(a)Intensity



(b)发散度

(b)Divergence

图 5 单会聚时不同组合的输出中子束流

Fig. 5 Output neutnm flow of different combination designs of single focus neutron guide

图 5 给出了不同组合时的输出中子束流强度及水平方向发散度。由图 5(a)中的不同组合设计时的输出中子束流强度可以看出,11[#]~14[#]的输出中子束流强度要高得多,且其大小基本上在同一个水平线上。通过表 4 中的计算数据比较可以看出,12[#]组合的输出中子束流强度相对要大一些。并且,从经济因素考虑,12[#]组合中会聚导管的垂直面超镜因子选择数值较小的 2,是最佳组合设计。图 5(b)给出的是不同组合设计时输出中子束流的水平方向发散度。11[#]~14[#]组的输出中子束流水平方向的发散度基本上处于同一个水平线,波动微小。

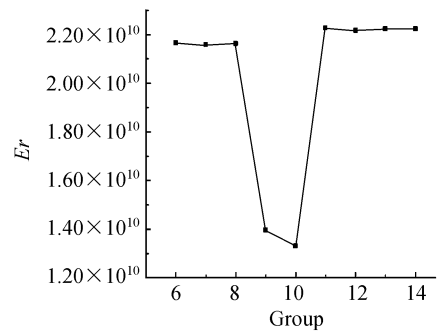


图 6 单会聚时不同组合的输出中子束流有效比

Fig. 6 Output neutron efficiency ratios of different combination designs of single focus neutron guide

图 6 给出了 6[#]~14[#]组合时的输出中子束

流有效比 Er , 由图中明显可以看出, $11^\# \sim 14^\#$ 组合设计为最佳组, 考虑到经济因素, 采用单会聚时, 第 $12^\#$ 组为最佳组合设计。

5 结果与讨论

水平散射几何中子反射谱仪其样品表面是垂直放置的, 由于要求入射到样品水平方向上的中子束流发散度线性要比较好, 以便降低实验误差, 因此, 组合设计重点考虑水平方向上的中子束流发散度。

实际设计过程当中, 在样品台前常常还使用双狭缝束流准直器来降低中子束流的发散度, 从而提高谱仪分辨率。但在中子束流强度损失不是过大的情况下, 中子束流的发散度最好是在前端设计中降低, 以避免靠近样品台时增大中子的环境本底, 从而从另外一个方面影响实验精确度。考虑到上述因素, 结合水平散射几何中子反射谱仪的需求, $12^\#$ 组合设计更能满足中子反射谱仪高分辨率的需求。当然, $4^\#$ 设计组合也有其独特的优点, 对于一些水平方向束流发散要求不高, 对束流强度更为关注的中子散射谱仪可采用 $4^\#$ 组合设计方案。

由计算结果来看, 针对水平散射几何模式中子反射谱仪的客观需求, 采用单会聚导管更有为

有利, 相对于采用双会聚导管, 输出中子束流强度下降约 1 倍, 但水平方向的发散降低约 1 个数量级, 这也是由于模型的设计主要关注了垂直方向会聚的作用。从提高中子束流强度上来看, 闸门内表面最好选择超镜而不是吸收材料。

输出中子束流的强度未严格随着超镜因子的增大而增长, 造成此情况出现的主要原因可能有如下 3 个: (1) 目前引进的超镜工艺, 超镜因子 $m=2$ 的截止反射率比 $m=3$ 的截止反射率高得多; (2) 入射中子束流本身发散足够的小, 超镜因子对中子束流的放大作用不大; (3) 模拟计算误差。本文根据客观需求, 获得了水平散射几何中子反射谱仪在特定工艺及客观条件下的最佳组合设计, 为谱仪的理论设计奠定了基础。

6 结 论

根据水平散射几何中子反射谱仪的客观需求, 采用数值计算方法分别对多种闸门与聚焦导管的组合模型进行了计算。计算结果表明: 会聚导管的最佳组合最好采用水平面会聚, 垂直面不会聚, 闸门内表面超镜因子为 2, 会聚导管水平面超镜因子为 3, 垂直面超镜因子为 2。计算结果可为水平散射几何中子反射谱仪的前端设计提供技术支撑。

参考文献:

- [1] IZERROUKEN M, GUEDIOURA B, SAICHI B, *et al.*. NUR reflectometer for neutron optics device investigations[J]. *Physica B*, 2005, 364: 29-32.
- [2] KAMPMANN R, HAESE S M, KUDRYASHOV V, *et al.*. Horizontal ToF-neutron reflectometer REFSANS at FRM-II Munich/Germany: first and status[J]. *Physica B*, 2006, 385-386: 1161-1163.
- [3] JAMES M, NELSON A, SCHULZ J C, *et al.*. A new neutron reflectometer at Australia's HIFAR research reactor[J]. *Nucl. Instru. And Meth. A*, 2005, 536: 165-175.
- [4] MASAYASU T, YASUO E. A new pulsed polarized neutron reflectometer, PORE, at KENS[J]. *Physica B*, 1999, 267-268: 185-189.
- [5] LEE J S, HONG K P, CHOI B H. A new thermal neutron reflectometer at HANARO [J]. *Physica*

B, 2006, 385-386: 1158-1160.

- [6] CLEMENS D, GROSS P, KELLER P, *et al.*. AMOR-the versatile reflectometer at SINQ [J]. *Physica B*, 2000, 276-278: 140-141.
- [7] MILDNER D F R, CHEN M H H, LAMAZE G P, *et al.*. Characterization of a cold neutron beam from a curved guide[J]. *Nucl. Instru. And Meth. A*, 1998, 413: 341-351.
- [8] VERKERK P, VAN WELL A A, REKVELDT M T. Transmission of thermal and fast neutrons and GAMMA in a novel filter[J]. *Physica B*, 1989, 156-157: 544-546.
- [9] VAN WELL A A, DE HANN V O. The average number of reflections in a curved neutron guide[J]. *Nucl. Instru. And Meth. A*, 1991, 309: 284-286.
- [10] 李新喜, 王燕, 黄朝强, 等. 斩盘产生的中子脉冲特性[J]. *光学精密工程*, 2009, 17(9): 2112-2119.
- LI X X, WANG Y, HUANG CH Q, *et al.*. Neutron pulse speciality produced by chop disk[J].

Opt. Precision Eng., 2009, 17(9):2112-2119. (in Chinese)

[11] 陈良,彭梅,孙良卫,等. SANS 准直器的蒙特卡罗模拟[J]. 现代科学仪器, 2009, 4:25-28.

CHEN L, PENG M, SUN L W, *et al.*. Monte-carlo simulation of SANS collimator[J]. *Modern Scientific Instruments*, 2009, 4:25-28. (in Chinese)

[12] PUSENKOV V M, SCHEBETOV A, GIBBUS H P M, *et al.*. Numerical calculation of neutron flu-

xes at the exit of a complex neutron-guide system at IRI, Delft [J]. *Nucl. Instr. and Meth. A*, 2002, 492:105.

[13] VAN WELL A A, FREDRIKZE H. On the resolution and intensity of a time-of-flight neutron reflectometer[J]. *Physica B*, 2005, 357:204-207.

[14] VAN WELL A A. Double-disk chopper for neutron time-of-flight experiments [J]. *Physica B*, 1992, 180-181:959-961.

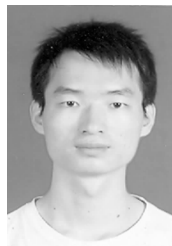
作者简介:



李新喜(1976—),男,河南兰考人,助理研究员,2000年于河南师范大学获学士学位,2003年于四川大学获硕士学位,主要从事中子反射技术与应用的研究。E-mail: hklxx@sina.com



黄朝强(1981—),男,贵州德江人,助理研究员,2003年于四川大学获学士学位,2006年于中国工程物理研究院获硕士学位,主要从事中子散射技术及应用的研究。E-mail: C. Q. Huang@163.com



王 燕(1983—),男,湖南张家界人,研究实习员,2006年于上海交通大学获得学士学位,主要从事中子反射技术及应用的研究。E-mail: wangyan3591@163.com



陈 波(1958—),男,四川成都人,博士后,研究员,博士生导师,1988年于成都科技大学获得硕士学位,1998年于四川大学获得博士学位,主要从事中子散射技术与应用研究。E-mail: chenbo_58@yahoo.com.cn

● 下期预告

球面拼接镜相对曲率半径测量

林旭东^{1,2}, 陈 涛¹, 明 名¹, 王建立¹, 陈宝刚¹, 董 磊¹

(1. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033;

2. 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

加工制作拼接镜的最大难题是匹配各子镜,也就是使各子镜的曲率半径完全匹配,使其能够等效成一个单一的主镜。对于球面拼接镜,就是要求各子镜的曲率半径相同。本文提出了一种使用 Shack-Hartmann 传感器和高精度球径仪对球面子镜的相对曲率半径进行测量的新方法,并建立了一个实验系统。该方法先使用共焦调整方法使各子镜共焦;然后,用 S-H 传感器测量子镜的轴向离焦量,轴向调整压电陶瓷促动器,使由传感器测得的离焦量接近于 0;再对子镜进行一次共焦调整之后,即可使用高精度球径仪测量出各子镜之间的相对曲率半径差。实验中,拼接镜由三块边长 300 mm 的正六边形子镜组成,子镜为球面,设计曲率半径为 2 000 mm。分析及实验表明,该方法测得的球面拼接子镜的相对曲率半径差精度约为 1 μm ,适用于大型球面拼接镜面望远镜各子镜相对曲率半径的检测。