

弧矢压弯晶面扭曲问题研究

余盛辉¹ 薛松¹ 祝万钱¹ 卢启鹏² 彭中琦²

1 (中国科学院上海应用物理研究所 嘉定园区 上海 201800)

2 (中国科学院长春光学精密机械与物理研究所 长春 130033)

摘要 抑制压弯晶体的扭曲是弧矢聚焦双晶单色器研制过程中的一个重大技术难题。根据上海光源所使用单色器,建立各向异性有限元模型,模拟了影响晶体面型的常见因素,从理论上探讨晶面扭曲的原因。分析结果显示,压弯机构对晶体的不均匀夹持是造成晶面扭曲的首要因素,晶体切割边界也对晶面扭曲有一定影响,不均匀夹持、切割边界造成扭曲的程度受到压弯方式的限定。

关键词 弧矢聚焦单色器,压弯晶体,晶面扭曲,有限元分析

中图分类号 TL503.4

弧矢聚焦双晶单色器由两块平行排布的晶体组成,其中第二晶体在压弯机构的作用下在弧矢方向呈圆柱形,能够在对同步光单色化的同时聚焦光束。然而,在压弯过程中容易出现晶面扭曲现象,导致同步光衍射光斑产生畸变,制约着单色器性能的提高。目前,国际上一般采用在线检测方法获知扭曲信息,通过旋转第二晶体或者误差补偿的方式减小晶面扭曲的危害^[1,2],专门针对扭曲机理的研究还未见报道。

上海光源一期建设的两条线站(14B, 16B)采用的弧矢聚焦双晶单色器^[3,4],在使用过程中也出现了光斑畸变现象。根据工程经验,本文选择一些最可能造成晶面扭曲的因素,通过有限元仿真方法研究这些因素的理论影响,从而探讨扭曲问题的机理,为该单色器的优化提供参考。以往关于晶体面型的有限元仿真工作一般将晶体作为各向同性材料处理,而本文建立各向异性有限元模型,以获得更接近实际情况的仿真效果。

1 晶面扭曲原因分析

图1是上海光源的一台弧矢聚焦双晶单色器的光斑畸变情况。图1(a)是该单色器初次完成安装调试后记录下的光斑,从光斑形状可以看出压弯晶体的面型比较理想,符合预期;后期使用过程中出现晶体断裂,在更换晶体重新装调后产生的光斑如图1(b)所示,从光斑情况可以推断出压弯晶体呈现扭曲面型。由于在更换晶体的过程中并没有对压弯机构做调整,出现变化而造成晶面扭曲的因素主要集

中在晶体加工与装配过程中。前后两块晶体是在不同工厂加工完成的,通过对比,两者在材料与加工工艺上并没有大的区别,最可能出现变化的因素在于晶体定向。由于加工过程只要求将衍射面定为111面,而晶体的另外两个切割边界并不要求定向,因此可能造成变化。而装配过程中,不确定因素比较多,最可能出现的情况是夹持机构对晶体的不均匀夹持。因此,本文将重点对晶体切割边界、不均匀夹持这两个因素的影响进行评估,同时考察夹持方式及肋边对晶体扭曲的影响。

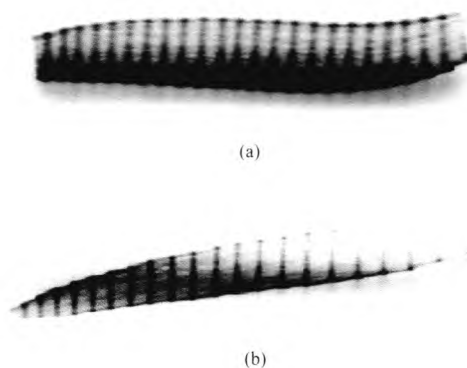


图1 光斑形状 (a) 初次装调, (b) 重新装调
Fig.1 Beam profiles of crystal. (a) first installed, (b) reinstalled

有限元仿真方法是压弯晶体面型研究中比较常用的一种手段^[5,6],可以通过模拟晶体压弯状况,对可能造成扭曲的因素进行分析。过去关于晶体面型

第一作者: 余盛辉, 男, 1988 年出生, 2013 年于中国科学院上海应用物理研究所获硕士学位

通讯作者: 薛松, E-mail: xuesong@sinap.ac.cn

收稿日期: 2013-03-08, 修回日期: 2013-04-29

的有限元仿真研究一般将晶体作为各向同性材料处理, 而压弯晶体实际上是各向异性的单晶硅材料。所谓各向异性, 是指各晶面和晶向上原子排列密度不同, 从而造成同一晶体的不同晶面和晶向上的力学性能不同。图 2a 是 Si 晶胞的结构, 阴影部分为 111 面, 将其显示在二维平面上, 如图 2b 所示。从中可以看出, 同样在 111 面上, 如图 2b 所示不同方向上的原子分布不同。由于硅晶体是由晶胞规则排序组成的, 在宏观上不同方向原子排列密度不同, 从而显示出各向异性。垂直于晶面且大小相同的力, 沿着图示不同方向的排布将会受到不同的变形阻抗, 如果某一方向变形阻抗不一致, 将导致受力不平衡, 从而可能造成扭曲面型。而将硅晶体作为各向同性材料处理, 就忽略了不同切割晶向造成晶面扭曲的可能性, 本文需要研究晶体切割边界的影响, 同时也为了更好地模拟实际的晶体压弯状况, 采用各向异性有限元模型。

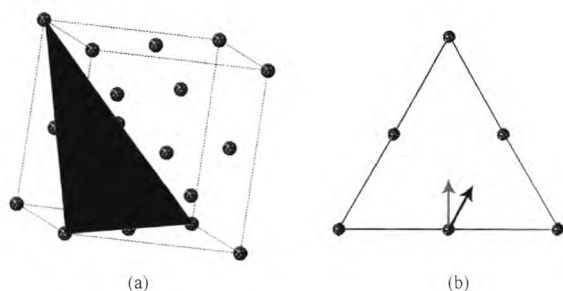


图 2 Si 晶胞的三维结构(a)和 111 面二维结构(b)
Fig.2 Unit cell of Si displays in three-dimension (a) and 111 plane (b).

采用各向异性有限元模型时, 不同切割边界下的力学性能差异体现在弹性系数矩阵上。晶体的三个切割晶向对应着一个坐标系, 于是不同的切割边界对应着不同的坐标系, 相应的弹性系数矩阵可以由坐标变换获得^[7]。

需要说明的是在有限元仿真过程中对变形模式的选择。根据 Krisch^[8]的研究, 当晶体的最大变形 d 小于晶体厚度 e 时按小变形问题处理, 当 $d > e$ 时则必须依据大变形理论处理。本文中压弯晶体长度 $l = 98 \text{ mm}$, 厚度 $e = 0.8 \text{ mm}$, 设定的压弯半径 $R = 2000 \text{ mm}$, 根据几何关系计算出 $d = 0.6002 \text{ mm}$, $d < e$, 因此作为小变形问题处理。

2 扭曲因素研究

在对可能造成晶面扭曲的因素进行分析的过程中, 为了单独评估各项因素的影响, 需要排除其他因素的干扰, 分析的有限元模型将从考虑单独因素的简单模型发展到考虑组合因素的复杂模型。按照模型由简至繁的顺序, 下面将依次对切割边界、夹持方式、肋边、不均匀夹持的影响进行研究。

2.1 切割边界影响

晶体的不同切割边界导致其在边界方向上表现出不同的力学性能, 在相同加载条件下会得到不同的面型情况。从微观晶体结构角度上看, 边界上的均匀载荷施加在非均匀排布的原子结构上时, 可能会产生扭曲现象。由于本文中晶体的主切割面已确定为 111 面, 只需要研究另外两个切割边界变化时的面型情况。

为了单独考虑切割边界对面型的影响, 首先采用一个相对简单的机构原型。如图 3(a)所示, 是布鲁克海文实验室使用的一个压弯机构^[9], 实际边界条件是: 压弯机构在两侧施加一对弯矩带动晶体弯曲, 同时又对其起限位作用。如图 3(c)所示, 在有限元模型中弯矩被简化为 2 组压力载荷均匀施加在晶面上, 而该限位方式较难模拟, 将其转化为晶面中心节点的一个点约束, 以保证在简单边界条件下完成限位。晶体的长宽厚分别为 98 mm (x 轴, 弧矢方向), 60 mm (z 轴, 子午方向), 0.8 mm (y 轴, 垂直晶面方向)。本文目的是衡量晶体中心区域达到 2 m 弧矢半径时的面型情况, 故以该弧矢半径为标准, 逆向调整载荷大小。

弹性系数矩阵是决定不同切割边界下力学性质的关键变量, 可由坐标变换获得。首先从 Landolt-Boernstein 数据库获得 Si 晶体的原始弹性系数矩阵, 然后将其转化到 111 面上预设的原始切割边界下, 如图 3b 所示, 其相应的切割晶向为 $x[\bar{1}10]$ 、 $y[111]$ 、 $z[11\bar{2}]$ 。在原始切割边界基础上, 通过坐标沿 y 轴旋转, 就能模拟 111 面上不同切割边界的情况, 从而进行对比分析。以下约定用旋转角度命名新得到的切割边界, 例如沿 y 轴逆时针旋转 30° 得到的边界, 称为“ 30° 切割边界”。

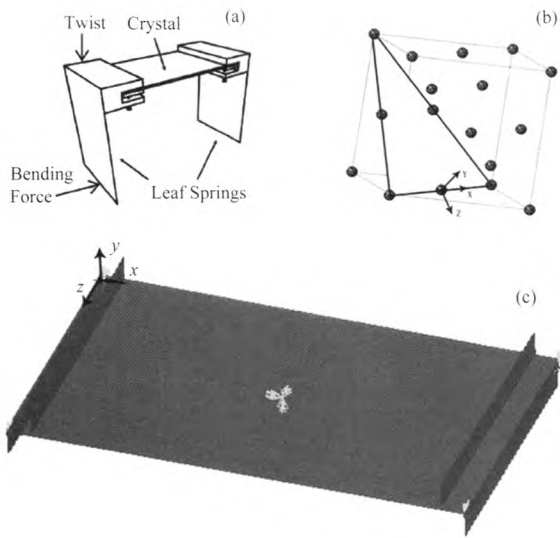


图3 布鲁克海文压弯机构原型(a)、原始切割边界(b)和有限元模型(c)

Fig.3 Brookhaven bending mechanism (a), presupposed original boundary (b) and FEA model (c).

首先考察原始切割边界晶体在压弯状况下的面型,图4(a)为压弯晶面的位移云图(等轴侧视图与俯视图),可以看出等位移线沿子午、弧矢中心轴对称分布,表明在该切割方向下,晶面不存在扭曲问题,等位移线只显示了鞍形形变的存在。

当切割边界沿 y 轴逆时针旋转改变时,采用相同边界条件得到的分析结果中,等位移线开始偏移,不再沿弧矢中心轴对称,这种对称轴的偏移显示了扭曲现象。如图4(b)所示,每隔 10° 选取一个切割边界,比对压弯面型情况(俯视图)。可以看出,等位移线的对称轴随着切割边界变化产生偏移,等位移线呈现周期性变化: 0° – 30° 切割边界内,对称轴沿逆时针旋转; 30° – 60° 切割边界内,对称轴沿顺时针往回偏移, 60° 角的状态与原始切割边界一致; 60° – 90° 切割边界内,对称轴继续沿顺时针方向偏移; 90° – 120° 切割边界内,对称轴沿逆时针往回偏移,如此周而复始。观察不同切割边界下的面型变化情况,发现在 30° 、 90° 切割边界下,等位移线的对称轴与原始对称轴偏离最大,此时的扭曲状况最为严重。

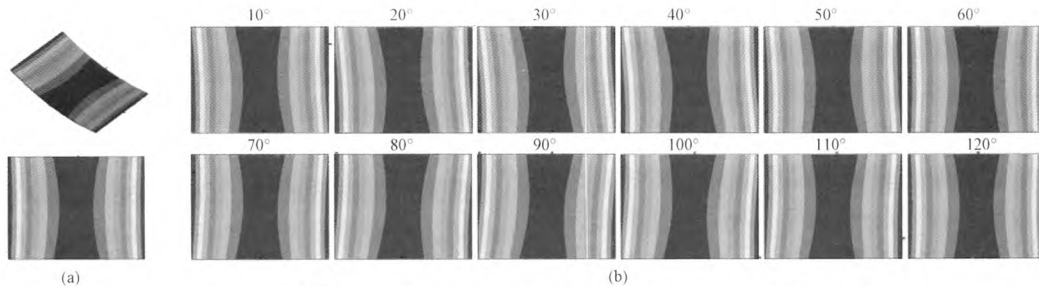


图4 压弯面型云图 (a) 原始切割边界, (b) 10° – 120° 切割边界

Fig.4 Displacement contour of bending crystal cut along (a) original boundary, (b) boundaries of 10° – 120° .

回到原始切割边界下,设 L 为晶体长度的一半,以弧矢方向中心轴为起点,向左侧偏移 $(1/4)L$ 、 $(1/2)L$ 、 $(3/4)L$ 、 L (在分析模型中 $L=49\text{ mm}$,用 x 表征与中心轴距离),分别取横截面观察子午方向上的面型情况,图5(a)为这些横截面上的面型斜率误差曲线(以下简称为“子午斜率误差”),在所取的所有截面上,斜率误差曲线均为沿 $(0,0)$ 点中心对称的直线,斜率误差变化说明存在鞍形形变,但没有扭曲情况。其中最上方的直线对应的是 $x=0$ 的情况,其斜率误差范围最大,鞍形形变最明显,最大斜率误差为 2.26 mrad 。可将图5(a)的曲线作为无扭曲情况的参考标准,比对其他面型的扭曲情况。晶体右半部分的面型情况与左半部分类似,只是方向相反。

30° 、 90° 切割边界下,扭曲状况最为严重,因此考察 30° 切割边界情况,即晶向为 $x[\bar{2}11]$ 、 $y[111]$ 、 $z[01\bar{1}]$ 时,将获得的面型数据在 Matlab 中显示,如图5(c)所示。可以看出晶面左下角的位移比左上角小 $118\text{ }\mu\text{m}$,右下角的位移比右上角大 $118\text{ }\mu\text{m}$,整个晶面呈现一个扭曲面型。同样以弧矢方向中心线为起点,向左侧偏移 $(1/4)L$ 、 $(1/2)L$ 、 $(3/4)L$ 、 L ,分别取横截面观察子午方向上的面型情况。图5(b)为子午斜率误差曲线,当 $x=0$ 时,斜率误差为沿 $(0,0)$ 点中心对称的直线,扭曲情况不明显;当 x 逐步增大,斜率误差曲线的对称中心开始偏离 $(0,0)$ 点,扭曲情况越来越严重。在 $x=(3/4)L$ 的时候最大面型斜率误差为 3.19 mrad ,相对于原始切割边界下取得的最大面型误差 2.26 mrad ,增加了 41.15% 。

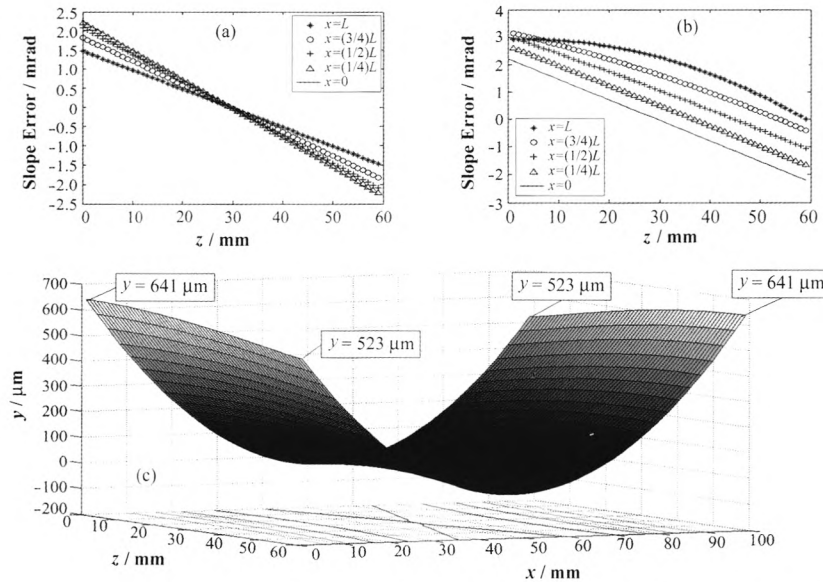


图5 子午斜率误差 (a) 原始切割边界, (b) 30°切割边界, (c) 30°切割边界下面型
Fig.5 Slope error curve of meridional cross sections of crystal cut along original boundary (a), boundary of 30° (b) and surface profile of bending crystal cut along boundary of 30° (c).

2.2 夹持方式影响

不同的夹持方式导致压弯机构在晶体上的施力点、作用力方向不同,也就造成不同的面型效果,不恰当的压弯方式可能使晶体扭曲更容易产生。布鲁克海文实验室使用的压弯机构原型(图3)与上海光源实际使用的压弯机构在夹持方式上存在区别,前者作用力主要分布在垂直于晶面方向,而后者作用力主要分布在平行于晶面方向。为了考察夹持方式的影响,以这两种夹持方式为例,对比分析其压弯面型。晶体压弯时,如果作用力均匀,这些作用力都能造成纯弯力矩的效果,差别不大,但由于机

构误差的原因,在进行加载时很容易造成受力不均的状况,图6显示了布鲁克海文压弯模型(简单模型)与上海光源压弯模型(凹槽模型)可能遇到的两种不均匀加载情况:(1)同侧紧夹持(如图6(a)、6(c)所示),假设压弯机构与晶体内侧($z=0$ 侧)公差较小,夹持更紧因而夹持力更大,往外侧夹持力逐渐减小;(2)对角紧夹持(如图6(b)、6(d)所示),左外侧夹持力最大,往内侧递减;右内侧夹持力最大,往外侧递减。为了单独考虑夹持方式的影响,晶体模型采用原始切割边界下的数据,进而对比两种夹持方式在受力不均情况下的面型变化。

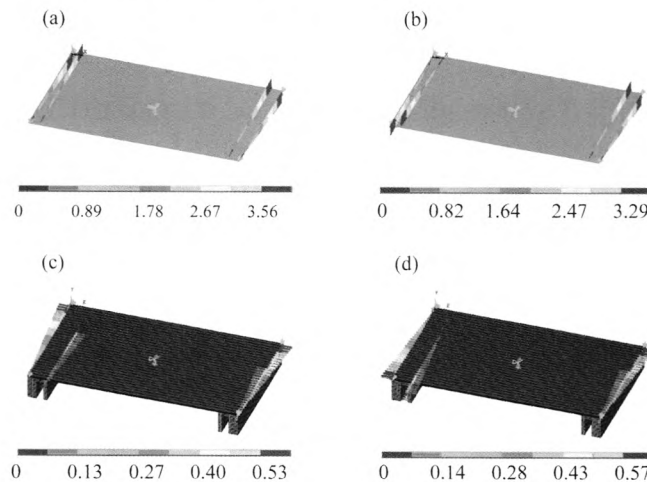


图6 简单模型同侧紧夹持(a),简单模型对角紧夹持(b),凹槽模型同侧紧夹持(c),凹槽模型对角紧夹持(d)
Fig.6 Simple model with tighter clamp distribution in same side (a) and catercorner (b), groove model with tighter clamp distribution in same side (c) and catercorner (d).

简单模型情况下, 图 7(a)、7(b)列出了同侧紧夹持和对角紧夹持状况下的子午斜率误差曲线。可以看出同侧紧夹持对晶面中心影响较大, 造成的最大斜率误差 4.29 mrad, 相对于均匀夹持情况下的 2.26 mrad, 增大了 89.82%; 而对角紧夹持对晶面外围($x > (3/4)L$ 区域)造成比较大的影响, 对晶面中心影响不大, 由于光束作用面主要在中心区域, 在本组数据中, 取 $x = (3/4)L$ 上的最大斜率误差作为面型误

差的参考。最大斜率误差为 2.361 mrad, 与均匀夹持条件下的最大斜率误差相差不大。

凹槽模型情况下, 图 7(c)、7(d)列出了同侧紧夹持和对角紧夹持状况下的子午斜率误差曲线。可以看出, 即使在非均匀夹持的情况下, 凹槽模型的斜率误差相对于简单模型要小得多, 只有 1 mrad 左右, 这种夹持方式对抑制扭曲面型起到非常明显的作用。

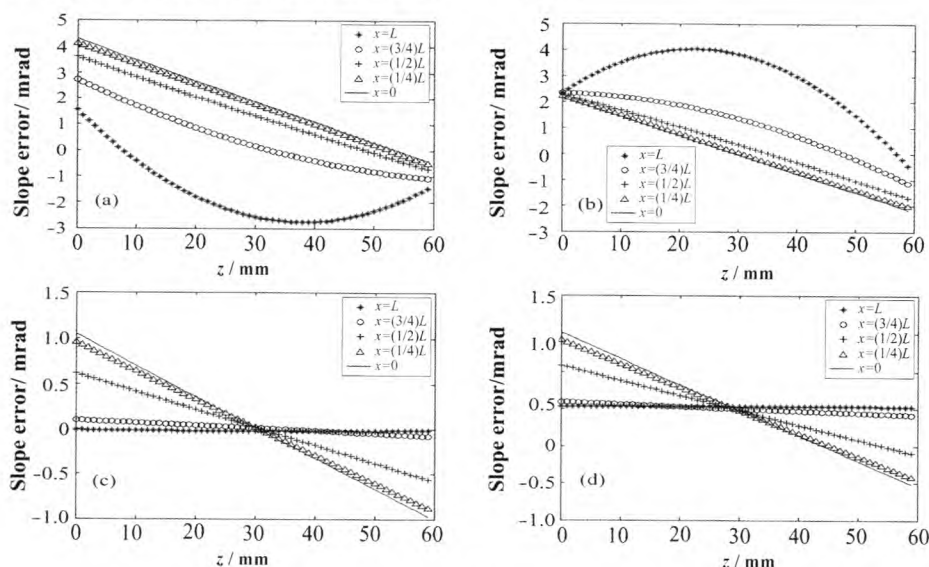


图 7 子午斜率误差 (a) 简单模型同侧紧夹持, (b) 简单模型对角紧夹持, (c) 凹槽模型同侧紧夹持, (d) 凹槽模型对角紧夹持

Fig.7 Slope error curve of simple model with tighter clamp distribution in same side (a) and catercorner (b). Groove model with tighter clamp distribute in same side (c) and catercorner (d).

2.3 肋边影响

压弯晶体一般采用加肋方式抑制鞍形形变, 肋边的存在对面型影响较大, 需要进一步考察其对扭曲状况的影响。对肋边影响的研究同对夹持方式的研究一样, 并不是为了直接说明上海光源弧矢聚焦双晶单色器产生晶面扭曲的原因, 事实上该压弯晶体更换前后都带有肋边与凹槽。这两个因素的研究主要是比较夹持方式的优劣、考察肋边存在的必要性, 为后期的优化设计工作提供依据。上一节已经证明在夹持方式的选择上, 凹槽模型是相对比较合理的, 故本节将在该模型的基础上考察肋边的影响。

采用凹槽同侧紧夹持模型, 晶体选择 30° 切割边界, 也就是对不均匀夹持与切割边界这两个因素进行组合, 在能够造成扭曲的条件下, 对比无肋边与有肋边状况下的晶面扭曲情况。图 8(a)是无肋边模型, 图 8(c)是得到的子午斜率误差曲线, 该曲线由 3 条斜向延伸的直线与 2 条横向排布的直线组成。在子午斜率误差曲线中, 最理想的面型状况就是得到纵坐标为零的横线, 表示不存在面型斜率误差。斜线表示鞍形形变, 横线表征鞍形形变得到抑制,

而曲线中心点偏离(0,0)点的距离则表征晶面扭曲的程度。从图 8(c)可以看出, 在弧矢中心轴上, 即 $x=0$ 时, 曲线基本沿(0,0)点中心对称分布, 同时斜率绝对值最大, 说明鞍形形变最为明显但扭曲很小; 在 $x=(1/4)L$ 与 $x=(1/2)L$ 位置, 曲线中心开始偏移(0,0)点, 同时斜率绝对值有所减小, 表明扭曲逐步加重, 鞍形形变逐渐变小; 在 $x=(3/4)L$ 与 $x=L$ 时, 曲线中心越发偏离, 斜率绝对值却变得很小, 面型主要显示为晶面扭曲, 鞍形形变很小。在 $x=0$ 、 $(1/4)L$ 、 $(1/2)L$ 、 $(3/4)L$ 、 L 位置, 曲线的中心点纵坐标分别位于 0.016、0.320、0.581、0.726、0.712 位置。

在同侧紧夹持凹槽模型基础上加入肋边, 如图 8(b)所示, 肋边宽度 0.4 mm, 高度 10 mm, 肋边间距 1.6 mm。其子午斜率误差曲线如图 8(d)所示, 可以看出肋边的存在使得鞍形形变几乎消失, 曲线近似于纵坐标不变的横线。考察晶面扭曲的情况, 在 $x=0$ 、 $(1/4)L$ 、 $(1/2)L$ 、 $(3/4)L$ 、 L 位置, 曲线的中心点纵坐标分别位于 0.028、0.244、0.434、0.544、0.526 位置, 相对于无肋边时的数据, 分别变化了 +75%、-23.75%、-25.30%、-25.07%、-26.12%, 除 $x=0$ 位置扭曲情况加重以外, 其他位置的数值都有接近

1/4 左右的减少。由于中心位置斜率误差基数较小, 增长 75%以后也相对于外延区域小很多, 所以总体

上讲, 肋边的存在对抑制晶面扭曲起到了一定帮助, 有助于改善面型。

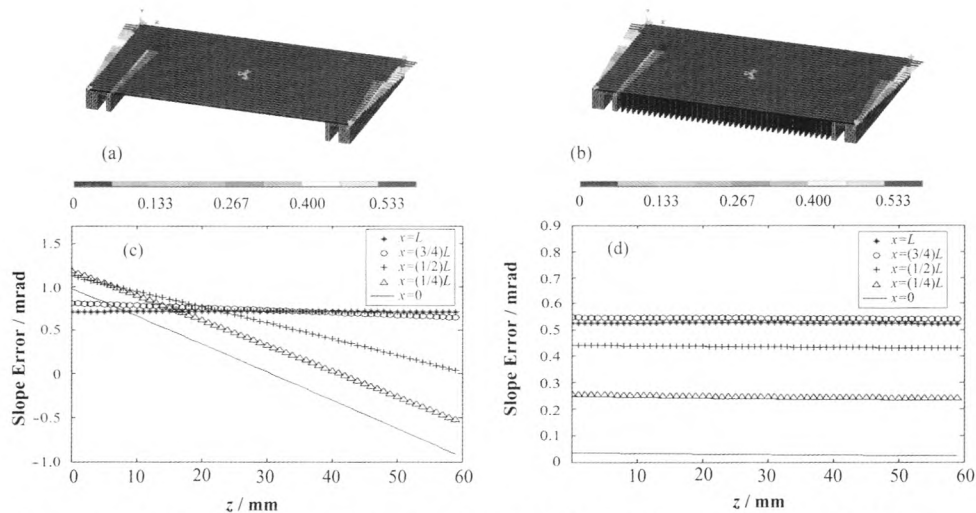


图 8 无肋边模型(a), 肋边模型(b), 无肋边模型子午斜率误差(c), 肋边模型子午斜率误差(d)
Fig. 8 FEA model without ribs (a) and with ribs (b), slope error curve of model without ribs (c) and with ribs (d).

2.4 不均匀夹持影响

在讨论切割边界、夹持方式及肋边对晶体面型影响的过程中已涉及到不均匀夹持的影响, 但还不够全面, 本节将在包含压弯机构的完整模型上单独讨论不均匀夹持的影响。

图 9(a)是上海光源所使用的晶体压弯装置模型, 由于装配需要, 实际压弯机构和晶体凹槽之间留有一定间隙, 在装配过程中很可能出现夹持机构与晶体凹槽局部接触, 也就是不均匀夹持的状况, 即使作用力均匀施加在两摆杆上, 最终也主要传递

到晶体凹槽与压弯机构接触的局部区域。首先选择原始切割边界的晶体, 将其压弯到 2 m 半径, 得到的晶面位移云图如图 9(b)所示, 倾斜的等位移线表示了晶面扭曲的存在。图 9(c)是相应的子午斜率误差曲线, 可以看到鞍形形变基本不存在, 斜率误差由晶面扭曲造成, 最大斜率误差 2.32 mrad。采用 30° 切割边界, 得到的面型情况与图 9(b)相似, 子午斜率误差如图 9(d)所示, 斜率误差相对于原始切割边界有所放大, 其中最大斜率误差为 2.58 mrad, 相比增大了 11.2%。

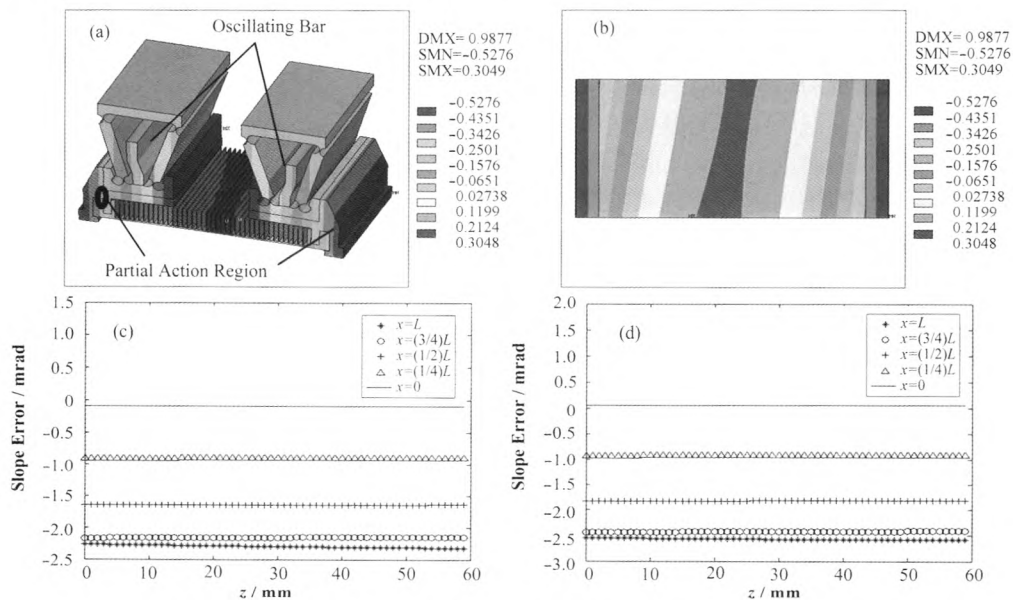


图 9 晶体压弯装置完整模型(a), 原始切割边界下晶面位移云图(b), 原始切割边界下的子午斜率误差(c), 30° 切割边界下的子午斜率误差(d)

Fig.9 Integrated FEA model of bending mechanism (a), displacement contour (b), slope error curve of bending crystal cut along original boundary (c), and slope error curve of crystal cut along boundary of 30° (d).

3 结语

通过建立各向异性有限元模型,研究了晶体切割边界、夹持方式、肋边、不均匀夹持的影响。结果表明,压弯机构对晶体的不均匀夹持是造成晶面扭曲的首要原因,晶体切割边界也对晶面扭曲有一定影响,不均匀夹持、切割边界造成扭曲的程度受到压弯方式的限定。晶体肋边对晶面扭曲的影响比较复杂,在本文的模型中有助于减小扭曲,但这还需要通过对其他模型的进一步研究方能确认。

参考文献

- Thomasset Muriel, Thierry Moreno, Blandine Capitanio, *et al.* In-situ metrology for the optimization of bent crystals used in hard-X-ray monochromators: comparison between measurement and simulation[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2010, **616**(2-3): 197-202
- Ferrer J L. Correction for the twist and the conical defects of a sagittally bent crystal[J]. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A, 1999, **431**(1-2): 224-233
- 何建华, 夏绍建, 侯铮迟, 等. SSRF 弧矢聚焦双晶单色器[J]. 高能物理与核物理, 2001, **25**(z1): 140-144
HE Jianhua, XIA Shaojian, HOU Zhengchi, *et al.* A double crystal monochromator of sagittal focusing at SSRF[J]. High Energy Physics and Nuclear Physics, 2001, **25**(z1): 140-144
- 汤琦, 马健康, 周泗忠, 等. 弧矢(Sagittal)聚焦双晶单色器设计[J]. 光学精密工程, 2002, **10**(4): 411-415
TANG Qi, MA Jiankang, ZHOU Sizhong, *et al.* Design of a sagittally focusing double-crystal monochromator in synchrotron radiation[J]. Optics and Precision Engineering, 2002, **10**(4): 411-415
- Hazemann J L, Nayouf K, Bergevin F De. Modelisation by finite elements of sagittal focusing[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1995, **B97**(1-4): 547-550
- Zhang L, Hustache R, Hignette O, *et al.* Design optimization of a flexural hinge-based bender for X-ray optics[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 1998, **5**: 804-807
- Lekhnitskii S G. Theory of elasticity of an anisotropic body[M]. Moscow: Mir Publishers, 1981: 15-50
- Krisch M, Freund A, Marot G, *et al.* Study of dynamically bent crystals for x-ray focusing optics[J]. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section a-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment, 1991, **305**(1): 208-213
- Shi X B, Ghose S, Zhong Z, *et al.* Surface curvatures and diffraction profiles of sagittally bent Laue crystals[J]. Journal of Applied Crystallography, 2011, **44**(4): 665-671

Study on twist problem of sagittally bent crystal

YU Shenghui¹ XUE Song¹ ZHU Wanqian¹ LU Qipeng² PENG Zhongqi²

¹(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Jiading Campus, Shanghai 201800, China)

²(Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China)

Abstract Background: The twist of bent crystal is a common problem of sagittal focusing monochromators. In Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF), one of monochromators has an unfocused beam profile because of crystal twist. **Purpose:** In order to amend the twist problem and get theoretical understanding for further design optimization, a study on the mechanism of crystal twist has been developed. **Methods:** Finite Element Analysis (FEA) models considering anisotropic effect of crystal were constructed to study some common factors, i.e. crystal orientation, clamping method, stiffening ribs and asymmetric clamping on the bent crystal profile. **Results:** The simulation result shows that among those factors, asymmetric clamping is the main reason causing the crystal twist while crystal orientation is also important. Clamping method is a factor that restricts the asymmetric clamping to a certain scale. **Conclusions:** For optimizing the system, asymmetric clamping should be controlled and crystal should be cut in a particular orientation.

Key words Sagittal focusing monochromator, Bent crystal, Twist of crystal, Finite element analysis

CLC TL503.4