

水平散射几何中子反射谱仪的三盘斩波器设计

李新喜 黄朝强 王 燕 陈 波

(中国工程物理研究院核物理与化学研究所 绵阳 621900)

摘要 为提高水平散射几何中子反射谱仪分辨, 希望谱仪前端的中子斩波器能斩出脉冲强度大水平发散度较小的中子脉冲束流, 采用新设计的三盘斩波器模型, 运用 Mcstas 程序软件考察了不同物理参数下三盘斩波器的中子斩波特性。获得了特定物理条件下相关物理参数对束流强度和发散度的影响关系曲线。计算结果可为水平散射几何中子反射谱仪中三盘斩波器的设计及物理参数的选择提供理论依据。

关键词 三盘斩波器, 模型设计, Mcstas 软件, 模拟计算

中图分类号 TL817⁺.9, O435⁺.2

中子反射研究范围由最初的聚合体薄膜、Langmuir 薄膜和表面活性剂迅速拓展到化学和生物界面研究, 一大批中子反射谱仪相继建造^[1-9]。中子反射谱仪分为恒定波长实验模式(Constant Wavelength, CW)和飞行时间实验模式(Time-of-Flight, TOF), 它们采用不同方法获取样品表面和界面的微观结构信息, CW 用单能中子改变掠入射角获得反射率曲线, TOF 用脉冲白光中子束流获得反射率曲线。从散射几何上, 中子反射谱仪分为水平散射几何和垂直散射几何。水平散射几何的入射和反射中子束流在水平面内, 实验样品表面垂直, 适合开展固-固、固-气表面和界面的研究。垂直散射几何的样品水平放置, 对样品的相无限制, 但对样品台的防震设施要求较高, 造价较高。对于无特殊要求的实验, 通常用水平散射几何样品台设计。

为提高 TOF 水平散射几何中子反射谱仪分辨, 希望在水平方向上有较小的束流发散度。目前, 相当多的 TOF 中子散射谱仪采用转盘式中子斩波器, 各斩波器的斩盘数、斩盘上窗口数各不相同, 从而斩波器的斩波性能有较大差别^[10-14]。单盘斩波器结构设计最简单, 可根据实验需求在斩盘上设计不同数目束流窗口。单斩盘束流脉冲为整个入射中子束流波段, 脉冲中子波段波长确定需在探测器前用辅助设备确认。双斩盘斩波器结构相对较复杂, 后一斩盘根据入射束流中子谱选择有效的中子波段^[15]。

采用三盘转盘式模型设计, 设计出发点主要是异向脉冲产生双斩盘与单斩盘的设计结合。用 Mcstas 模拟计算软件^[16]对设计的三盘位相中子斩波器模型, 进行模拟计算和理论探讨。获得了相关

物理参数对三盘位相中子斩波器的影响关系曲线, 为中子反射谱仪概念设计奠定了理论依据。

1 三盘斩波的基本结构模型

由于斩盘的转动方向、盘间距、斩盘窗口数不同, 三盘斩波器的设计方案有多种。本文采用如图 1 的三盘斩波器设计模型。1[#]斩盘和 2[#]斩盘的转动反向, 转速为 $\mp\omega$, 组合的主要作用是产生有较好中子束流特性的束流脉冲。图 1 中 “/” 表示斩盘上留有供中子通过的窗口, 1[#]和 2[#]斩盘的斩窗间无位相差。

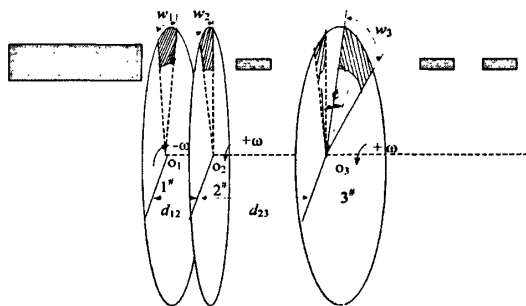


图 1 三盘斩波器的基本结构示意图
 w_1 、 w_2 、 w_3 : 1[#]、2[#]和 3[#]斩盘窗口对应的边缘弧线长; d_{12} 、 d_{23} : 1[#]和 2[#]斩盘与 2[#]和 3[#]斩盘间的盘间距;
 ϕ : 2[#]和 3[#]斩盘窗口间的位相差

Fig.1 The sketch map of triple disk chopper.
 w_1 , w_2 , w_3 —window arc length of 1[#], 2[#] and 3[#] disk edge respectively; d_{12} , d_{23} —space between 1[#] and 2[#], 2[#] and 3[#] disk respectively; ϕ —phase difference between 2[#] and 3[#].

三盘斩波器中每个斩盘的详细结构见图 2。

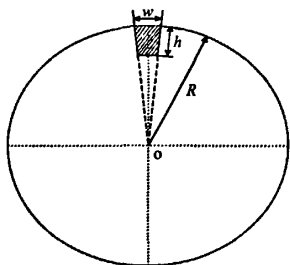


图2 斩盘结构示意图

R : 斩盘半径; w : 斩盘窗口张角对应的边缘弧线长; h : 窗口沿斩盘半径方向的长

Fig.2 The sketch map of chop disk frame.

R —radius of disk; w —window arc length of disk; h —radial length of window.

2 模拟计算

模拟计算采用 Maxwell 谱为中子输入谱, 束流强度为 $3.36 \times 10^{10} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 特征波长为 0.4 nm , 入口中子束流截面高 120 mm 、宽 10 mm 。

2.1 $1^{\#}$ 和 $2^{\#}$ 斩盘窗口弧线长变化的计算结果

三盘斩波器前两盘主要作用是产生有较好束流特性的中子脉冲 ($1^{\#}$ 和 $2^{\#}$ 斩盘简称脉冲双盘)。异向旋转双中子斩盘在不同瞬间的示意图见图 3。图 3 中 a-g 分别代表中子斩盘处于不同时刻的瞬间, 是一个周期性循环过程。完全相同的脉冲中子斩盘在无位相差时, a-e 过程中子能从双盘窗口中飞出。d-g-a 过程由于较大波长的中子飞行速度较慢, 通过第一中子斩盘后到达第二斩盘时, 将碰到斩盘而被吸收或散射, 无法飞过第二斩盘, 这对中子脉冲的产生是一个较大的通量损失。

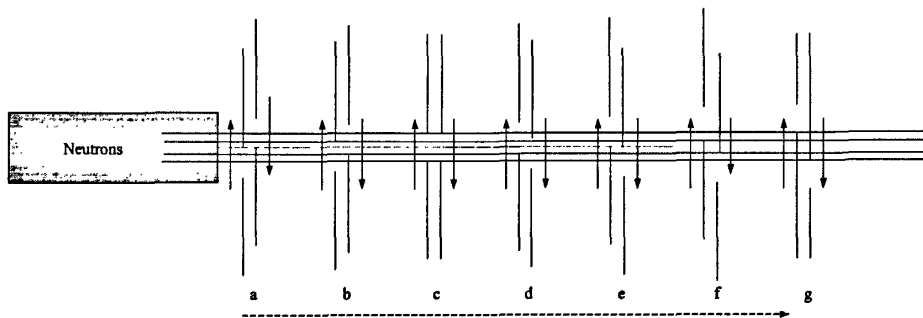


图3 异向旋转双中子斩盘在不同瞬间的示意图

Fig.3 Sketch map of double chop disk in opposite rotating direction at different moment.

如欲提高中子通量, 可将 $2^{\#}$ 窗口增大, 使其大于 $1^{\#}$ 斩盘窗口。但中子通量的增大常以增大中子发散度为代价。采用三盘斩波器是为获得更好的中子脉冲束流特性。

模拟计算输入参数为: $R=250 \text{ mm}$, $h=50 \text{ mm}$, $w_1=4 \text{ mm}$, $w_2=4 \text{ mm}$, $w_3=16 \text{ mm}$, $\omega=2100 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$, $\phi=1.2^\circ$ 。由此, $1^{\#}$ 和 $2^{\#}$ 斩盘上的窗口边缘弧线长完全一样, 盘间距 $d_{12}=100 \text{ mm}$, $d_{23}=200 \text{ mm}$ 。中子脉冲的束流强度随 w_1 和 w_2 变化的模拟结果(图 4a), 中子脉冲的束流强度随 w_1 和 w_2 的增大而减小, 相对斩波前, 中子脉冲束流强度下降约 3 个量级。

由中子脉冲发散度随 w_1 和 w_2 变化的模拟结果(图 4b), 随 w_1 和 w_2 增大中子脉冲的发散度逐渐增大, 发散度采用双高斯拟合计算结果。整体上看三

盘中子斩波器斩盘数目多, 窗口宽度相对不大, 中子脉冲发散度随 w_1 和 w_2 增大变化幅度不大。

2.2 $2^{\#}$ 与 $3^{\#}$ 斩盘间距变化对注量的影响

图 5(a)给出束流强度率随 d_{23} 变化的模拟计算结果。模拟计算的输入基本物理参数为: $R=250 \text{ mm}$, $h=50 \text{ mm}$, $w_3=16 \text{ mm}$, $d_{12}=100 \text{ mm}$, $\omega=2100 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$, $\phi=1.2^\circ$, $w_1=w_2=4 \text{ mm}$ 。计算结果表明, 中子脉冲随 d_{23} 增大迅速下降, 当 $d_{23} \geq 600$ 时, 中子注量下降两个量级。通常中子斩波器位于中子散射谱仪的前端, 中子通量的损失不要过大, 因此 d_{23} 最好 ≤ 400 。

图 5(b)给出中子脉冲发散随 d_{23} 增大的模拟计算结果。中子脉冲发散随 d_{23} 增大而下降, 但没有束流强度下降快。

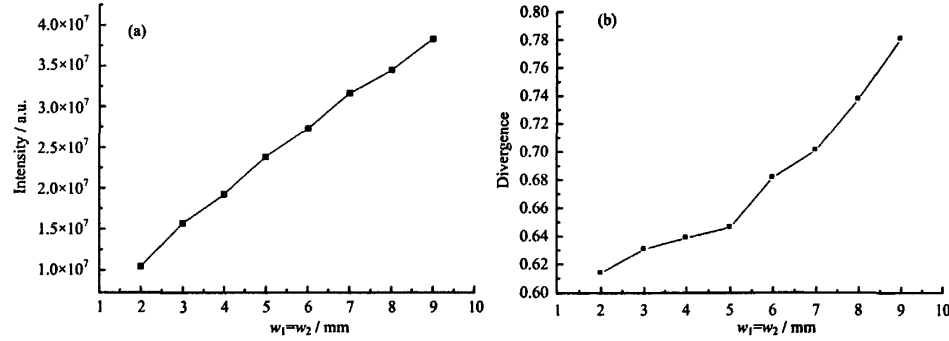


图 4 束流强度(a)、发散度(b)随 w_1 和 w_2 变化的函数关系
Fig.4 Intensity (a) and divergence (b) as function of w_1 and w_2 .

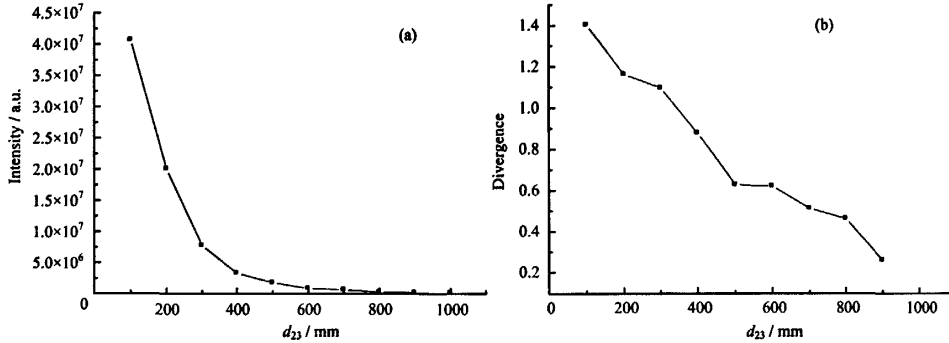


图 5 束流强度(a)、发散度(b)随 d_{23} 变化的函数关系
Fig.5 Intensity (a) and divergence (b) as function of d_{23} .

2.3 转速变化的影响

转速是斩波器设计中的一个重要参数，它影响到中子脉冲的波长分辨、通量大小及波段选取等相关脉冲束流特性的好坏^[15]。此外，由于电动马达的稳定性等原因，转速波动还是影响脉冲束流特性的一个重要影响参数。三盘斩波器束流强度随转速变化的模拟结果见图 6。

模拟计算参数为： $R=250$ mm， $h=50$ mm， $w_3=16$ mm， $d_{12}=100$ mm， $d_{23}=200$ mm， $\phi=1.2^\circ$ ，前两个斩盘窗口大小 $w_1=w_2=4$ mm。由图 6，束流强度随转速的增大有所下降的趋势，但较 d_{23} 的下降趋势要缓和些。

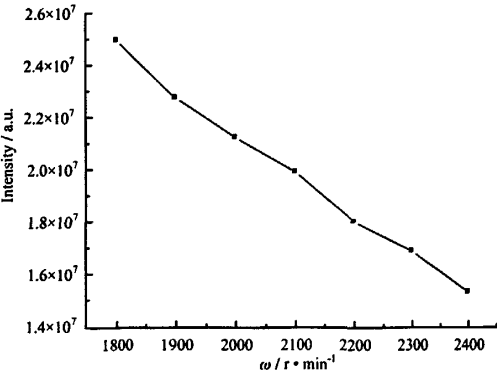


图 6 束流强度随斩波器转速的函数变化关系
Fig.6 Intensity as function of rotation frequency.

2.4 位相差变化的影响

图7给出束流强度随位相差 ϕ 的模拟计算结果。基本输入物理参数为: $R=250\text{ mm}$, $h=50\text{ mm}$, $w_3=16\text{ mm}$, $d_{12}=100\text{ mm}$, $d_{23}=200\text{ mm}$, $\omega=2100\text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$, $w_1=w_2=4\text{ mm}$ 。当 $\phi\leq 3.2^\circ$ 时, 束流强度随 ϕ 增大而增大。当 $\phi>3.2^\circ$ 时, 束流强度随 ϕ 增大逐渐下降。

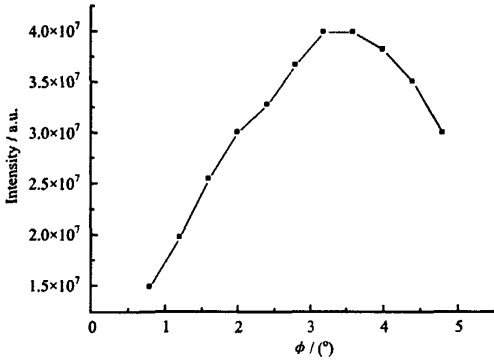


图7 束流强度随位相 ϕ 的函数变化关系
Fig.7 Intensity as function of phasic angle ϕ

2.5 3#斩盘窗口变化的影响

束流强度随 w_3 变化的模拟计算结果见图8。基本输入物理参数为: $R=250\text{ mm}$, $h=50\text{ mm}$, $d_{12}=100\text{ mm}$, $d_{23}=200\text{ mm}$, $\omega=2100\text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$, $\phi=1.2^\circ$, $w_1=w_2=4\text{ mm}$ 。由图8, 束流强度随 w_3 增大逐渐增大, 但增大幅度不大。

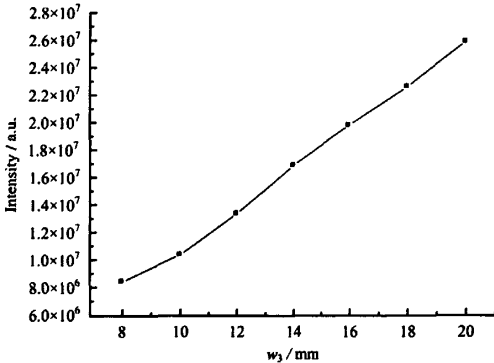


图8 束流强度随 w_3 变化的函数关系
Fig.8 Intensity as function of w_3 .

3 误差分析

对多数飞行时间模式中子散射谱仪, 斩波器的波长分辨用式(1)表示^[15]:

$$\Delta\lambda/\lambda = \Delta t/t_{\text{TOF}} \quad (1)$$

式中, Δt 为斩波器脉冲时间, t_{TOF} 为中子飞到探测器的时间。

t_{TOF} 通常是固定不变的, 因此中子斩波器的波长分辨主要取决于斩波器的脉冲时间。脉冲时间的大小取决于斩盘窗口张角的大小、转盘速度等。单向转盘的脉冲时间 Δt 为:

$$\Delta t = w/(\omega r) \quad (2)$$

误差产生理论上认为中子脉冲起始时间相同, 实际上最开始的中子飞行时间与最后进入窗口的中子存在 Δt 的时间偏差。

三斩盘中子斩波器的设计考虑到上述因素, 在相同窗口张角的情况下, 用双盘对向旋转将 Δt 时间降低一半, 提高了分辨。相当前两盘起到单盘作用产生一个中子脉冲, 双盘间距越小越好, 但过小会给机械设计带来相应的困难。

在时间-距离-维坐标系内, 中子运动可用式(3)描述:

$$t(z) = cz + t(0) \quad (3)$$

式中, c 为常数($c=m_n/h=2527.77\text{ }\mu\text{s}\cdot\text{nm}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$), z 是波长 λ 的中子在 t 时刻的位置。

由式(3), 中子通过 1#斩盘后, 飞行到 2#斩盘的时间 δt 内, 相应的 2#斩盘会转动一定的距离 δw , 就会有一部分中子无法从 2#斩盘的窗口飞出去, 造成中子通量损失。因此要尽可能地缩短 δt , 也就是缩短 d_{12} 。

4 讨论

蒙特卡罗方法是一种重要的模拟中子输运的方法, 在中子散射设备设计及优化中发挥着重要作用^[17,18]。本文采用常用的蒙特卡罗模拟计算软件 Mcstas 针对新设计的三盘中子位相斩波器的中子输运特性进行模拟计算, 根据实际输入的中子谱, 获得三盘斩波器相关物理参数对中子斩波器斩波特性的影响, 得到了具体的模拟计算结果, 结果对三盘斩波器使用, 相关物理参数及配套硬件的选择具有实际的参考价值。

由式(1)可知, 斩波器脉冲盘的中子脉冲特性, 实际上对整个中子斩波器的波长分辨有较大影响。因此, 中子脉冲盘的脉冲束流特性是斩波器设计中重点关注的结构之一。使用异向转动双盘作中子脉冲产生盘, 相对单盘中子斩波器或双盘斩波器的第一斩盘, 实际上避免了由于入射中子脉冲束流宽度和斩盘窗口不匹配带来的偏差。此外, 异向转动双盘是双盘相对转动, 相应缩短了脉冲时间 Δt , 提高了波长分辨。但实际使用中, 由于盘厚度、中子吸

收及空间的限制,脉冲双盘的间距有一定限制,不可能无限制地缩短。

为使三盘斩波器具有较好的波长分辨,计算采用 1[#]和 2[#]斩盘完全一致的结构模型。利用 Mcstas 模拟计算软件分别给出斩盘窗口、盘间距、位相差、斩盘转速等物理参数变化对三盘斩波器性能的影响曲线。从通量的模拟计算结果来看,三盘斩波器的设计通量损失约 3 个量级,在中子反射谱仪设计中可接受。脉冲双盘窗口大小的选择,主要是根据波长分辨需求设计,同时也要适当,不要造成中子束流过大的损失。盘间距 d_{23} 的增大会导致三盘斩波器中子束流损失加剧。因此,斩波器设计中,盘间距设计要慎重选择,尽可能不选择过大的盘间距。位相差的选择尽可能地在束流强度上升的位相段,本文的三盘斩波器设计中,选择 $\phi \leq 3.2^\circ$ 内,结合要选择的的中子波段^[15],选择合适的位相差。

三盘位相斩波器的误差形成相对较复杂。本文针对三盘斩波器可能形成的误差从理论上进行简单分析,以供三盘斩波器设计者参考。

计算表明,这种三盘斩波器的设计能很好地产生有较低发散度的中子脉冲,且通量损失不是很大。三盘斩波器设计有许多潜力可挖掘,例如将 2[#]盘窗口增大,盘上对称地多开几个相同的窗口等,这样可提高中子通量,但通常都是以提高发散为代价。此外,随脉冲甄别技术的提高及中子束流通量的增大,对多窗口斩盘和飞行到探测器的距离长短限制也越来越小。

参考文献

- Clemens D, Gross P, Keller P, *et al.* Physica B, 2000, 276-278: 140-141
- Lee J S, Hong K P, Choi B H, *et al.* Physica B, 2006, 385-386: 1158-1160
- Rücker U, Alefeld B, Bergs W, *et al.* Physica B, 2000, 276-278: 95-97
- Webster J, Holt S, Dalglish R. Physica B, 2006, 386-386: 1164-1166
- Kampmann R, Haese-Seiller M, Kudryashov V, *et al.* Physica B, 2006, 386-386: 1161-1163
- Menelle A. Physica B, 2004, 350: 767-769
- VanWell A A, Fredrikze H. Physica B, 2005, 357: 204-207
- Radzhabov A K, Gordeev G P, Lazebnik I M, *et al.* Physica B, 2007, 397: 156-158
- Masayasu T, Yasuo E. Physica B, 1999, 267-268: 185-189
- Mutka H. Physica B, 1992, 180-181: 929-931
- Kearley G J. Physica B, 1992, 180-181: 911-913
- Stunault A, Andersen K H, BlancY, *et al.* Physica B, 1992, 180-181: 926-928
- Copley J R D. Nucl Instr Meth A, 1988, 273: 67-76
- VanWell A A. Physica B, 1992, 180: 959-961
- 李新喜, 黄朝强, 王燕, 等. 核技术, 2008, 31(5): 392-395
LI Xinx, HUANG Chaoqiang, WANG Yan, *et al.* Nucl Tech, 2008, 31(5): 392-395
- <http://www.mcstas.org>
- 郭立平, 孙凯. 世界科技研究与发展, 2007, 29: 1-7
GUO Liping, SUN Kai. World Sci-Tech R&D, 2007, 29: 1-7
- 郭利平. 中国先进研究堆中子散射谱仪的模拟和优化研究. 中国原子能科学研究院博士论文, 2003
GUO Liping. Simulation and optimization on neutron scattering instruments at China advanced research reactor. China Institute of Atomic Energy Doctor's Degree Thesis, 2003

Triple-disk chopper design of horizontal neutron scattering reflectometer

LI Xinx HUANG Chaoqiang WANG Yan CHEN Bo

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

Abstract To improve the resolution of horizontal geometry scattering neutron reflectometer, strong but small divergence neutron pulse after the chopper of reflectometer is expected. Performance of a triple-disk chopper model with different physical parameters was simulated with Mcstas codes. The intensity and divergence as function of different physical parameters in given conditions were obtained. The results can provide theoretical basis for designing triple-disk chopper of a horizontal geometry scattering neutron reflectometer.

Key words Triple disk chopper, Model design, Mcstas codes, Simulation

CLC TL817⁺.9, O435⁺.2