

完美晶体双聚焦单色器与镶嵌晶体垂直 聚焦单色器的模拟研究

陈彦舟 孙光爱 黄朝强 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 为满足中子衍射应力分析谱仪高注量率和高分辨率的要求,采用蒙特卡罗模拟程序 SIMRES 对其单色器进行了模拟研究。分别从单色器衍射几何(对称、非对称和完全非对称)、聚焦条件(垂直和水平聚焦曲率)和晶体类型(完美晶体和镶嵌晶体)三个方面,以品质因子为量化指标,系统比较了与谱仪的注量率和分辨率的影响关系。研究结果表明:采用对称几何及完美晶体双聚焦方式可以获得最佳的谱仪性能。

关键词 蒙特卡罗模拟,中子衍射应力分析谱仪,聚焦单色器, SIMRES

中图分类号 O571.56

中子衍射应力分析谱仪主要用于工件内部应力场的无损测量。其取样体积小($1\sim 27\text{ mm}^3$),探测器记录的衍射信号弱,则样品处的入射中子束注量率应尽可能高^[1]。同时,谱仪须有较高分辨率($\Delta d/d$ 为 10^{-3} 量级)以确保应力测量的准确性。作为中子衍射应力谱仪的核心部件,晶体单色器对谱仪的分辨率和注量率都有重要影响,其研制至关重要^[2]。

镶嵌晶体垂直聚焦单色器已获广泛应用,用垂直聚焦压缩束斑高度技术,其注量率比平板单色器可提高2~5倍^[3]。完美晶体双聚焦单色器是一种新型单色器,利用水平和垂直聚焦提高注量率,并改善谱仪分辨率^[4]。镶嵌晶体和完美晶体的区别在于镶嵌宽度的大小。完美晶体镶嵌宽度一般仅几分,而镶嵌晶体的镶嵌宽度通常为 $20'\sim 25'$ 。常见的镶嵌晶体材料有锗、铜、热解石墨等。热解石墨反射率高,但次级污染严重。锗单晶次级污染较轻,但峰反射比却较低。铜的有效晶面多、反射效率较高,其获取热中子性能尤佳^[5]。硅是常见的完美晶体材料,无次级中子污染,生产工艺成熟。

然而,关于完美硅单晶双聚焦单色技术能否进一步提升装置性能,又如何影响装置的束流强度与分辨等问题,尚少系统研究。为比较完美晶体双聚焦单色器和镶嵌垂直聚焦单色器的性能,本文用蒙特卡罗射线追踪程序 SIMRES 6.0.5^[6]进行模拟计算,以在分辨率和散射中子强度间寻找最佳方案。本文的热中子孔道入口处中子能谱为麦克斯韦谱,与实际能谱略有所不同。

1 模型

中子衍射应力谱仪布局如图1所示。热中子源温度 $T_1=320\text{ K}$,积分注量率 $I_1=1.24\times 10^{14}\text{ cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ 。堆内水平孔道尺寸为 $60\text{ mm(宽)}\times 110\text{ mm(高)}\times 3780\text{ mm(长)}$ 。超镜直导管紧接水平孔道出口,尺寸为 $60\text{ mm(宽)}\times 110\text{ mm(高)}\times 5670\text{ mm(长)}$,内壁膜厚 0.1 mm ,吸收因子为 $1.0\times 10^{10}\text{ cm}^{-1}\cdot\text{\AA}^{-1}$,临界角增大因子 $m=2$ 。

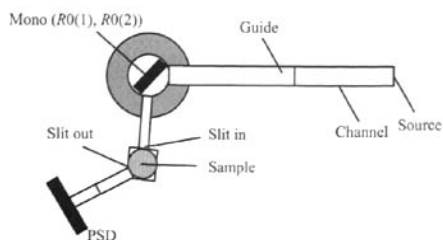


图1 中子衍射应力分析谱仪布局示意图

Fig.1 Schematic illustration of residual stress neutron diffractometer.

标准样品为 $\alpha\text{-Fe}(211)$,其衍射角 $2\theta_s$ 在 90° 附近($\lambda=1.65\text{ \AA}$),以使取样体积近似为立方体。 $\alpha\text{-Fe}(211)$ 反射面晶面多重度很高,可将结构导致的强度微扰降至最小^[1]。 $\Phi 6\text{ mm}\times 100\text{ mm}$ 圆柱形样品位于单色器后 2 m 处。样品相干散射截面 $\Sigma_s=0.9527\text{ cm}^{-1}$,吸收截面 $\Sigma_a=0.121\text{ cm}^{-1}\cdot\text{\AA}^{-1}$,非相干散射截面 $\Sigma_i=3.4\times 10^{-2}\text{ cm}^{-1}$,样品温度 $T=300\text{ K}$,结构因子

$F=0.802\text{ fm}\cdot\text{\AA}^{-3}$, 晶面间距 $d=1.1702\text{ \AA}$, 晶粒尺寸为 $1.0\times10^4\text{ \AA}$, 晶面多重度为 24。

样品前后限束孔尺寸均为 $3\text{ mm}\times3\text{ mm}$, 距离样品 50 mm 。位置灵敏探测器 PSD 位于样品后 1 m 处, 尺寸 $200\text{ mm}(\text{宽})\times200\text{ mm}(\text{高})\times20\text{ mm}(\text{厚})$, 空间分辨率为 1.8 mm , 效率因子为 $10\text{ \AA}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$ 。

2 蒙特卡罗模拟结果

2.1 单色器衍射几何

我们用品质因子 $\text{FoM}=I/\text{FWHM}^2$ [7] 量化谱仪性能, 其中, I 为探测器记录的中子强度 (s^{-1}), FWHM 为衍射峰半高宽 ($^\circ$)。FoM 越大, 谱仪强度与分辨率越均衡, 性能越好。

单色器有对称衍射(symmetry diffraction, SD)、非对称衍射(asymmetry diffraction, AD)和完全非对称衍射(fully asymmetry diffraction, FAD)等衍射几何(图 2)。本文对完美晶体双聚焦单色器的衍射几何作择优选择。Si(311)在常规起飞角($45^\circ\text{--}60^\circ$)范围内可获合适的单色中子($1.5\text{--}2\text{ \AA}$), 且 Si(311)的次级衍射与更高级次衍射的强度很弱, 均可忽略, 故选择 Si(311)为反射面。单色器宽 250 mm 、高 125 mm (5 组)、厚 5.68 mm (8 层), 距导管出口 0.96 m , 晶面间距 $d=1.6374\text{ \AA}$, 起飞角 $2\theta_M=60.7104^\circ$, 泊松比为 0.28 。模拟中, 假定单色器切割面为 Si(211), 则 AD-BC、AD-BE 与 FAD 衍射几何下的(311)面和单

色器表面夹角分别为 10° 、 -10° 与 31.5° 。计算各种衍射几何品质因子 FoM 前, 对单色器水平曲率 $R0(1)$ 和垂直曲率 $R0(2)$ 进行扫描优化, 优化过程见 2.2 节, 模拟结果见表 1。

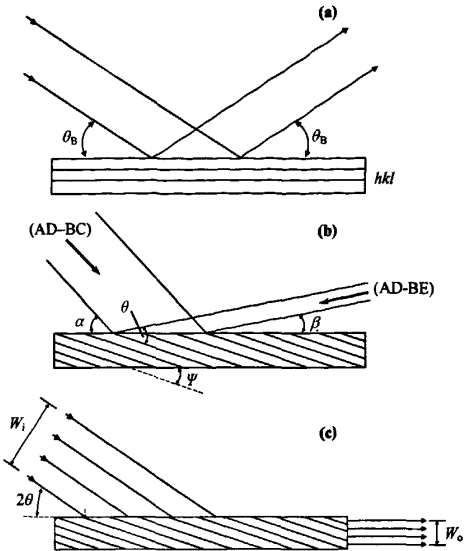


图 2 单色器衍射几何: (a) 对称衍射(SD), (b) 压缩型(左输入)和扩展型(右输入)非对称衍射(AD), (c) 完全非对称衍射(FAD)
Fig.2 Diffraction geometry of (a) symmetry diffraction (SD), (b) asymmetry diffraction (AD) with beam compression (AD-BC) and beam extension (AD-BE), and (c) fully asymmetry diffraction (FAD).

表 1 Si(311)在不同衍射几何下获得的 $\alpha\text{-Fe}(211)$ 衍射峰特征值
Table 1 Diffraction peaks of $\alpha\text{-Fe}(211)$ when Si (311) takes different diffraction geometries.

衍射几何类型 Type	水平聚焦曲率 $R0(1)/\text{m}^{-1}$	垂直聚焦曲率 $R0(2)/\text{m}^{-1}$	中子强度 I/s^{-1}	衍射峰半高宽 FWHM / $^\circ$	品质因子 FoM
AD-BC, $\Psi=10^\circ$	0.1398	0.5704	661.94	19.903	1.671
AD-BE, $\Psi=-10^\circ$	0.2184	0.5245	598.61	22.349	1.199
FAD, $\Psi=31.5^\circ$	0.02222	0.6469	120.59	24.659	0.198
SD, $\Psi=0^\circ$	0.17347	0.5551	874.06	21.047	1.973

从表 1 结果可知, Si(311)采用 SD 几何时, 强度高、分辨好, 品质因子 FoM 明显大于其它三种衍射几何。文献[1]通过实验得到 Si(311)各种衍射几何对应的 FoM 相对值: $\text{FoM}_{\text{SD}}=100$ 、 $\text{FoM}_{\text{ADBC}}=89$ 、 $\text{FoM}_{\text{ADBE}}=102$ 、 $\text{FoM}_{\text{FAD}}=11$ 。综合考虑单色器大小(SD 为 $200\text{ mm}\times32\text{ mm}\times3.9\text{ mm}$, AD 为 $200\text{ mm}\times40\text{ mm}\times3.9\text{ mm}$), SD 的性能最好。表 1 的结果与之一致。下文单色器均采用对称衍射几何。

2.2 水平和垂直聚焦曲率

当单色器起飞角和样品到单色器距离改变时,

聚焦倾角发生很大变化, 因此测量前必须精确调整单色器曲率, 以免损失中子强度、降低分辨率。

我们曾发现[8], 在 Cu 的常用晶面中(220)面获得的中子束注量率最大, 因此镶嵌晶体垂直聚焦单色器选择 Cu(220)作反射面。单色器宽 250 mm 、高 125 mm (5 组), 晶面间距 $d=1.278\text{ \AA}$, 起飞角 $2\theta_M=80.7033^\circ$, 镶嵌度设为 20° 各向同性, 泊松比为 0.3 。根据文献[9], 铜晶体厚度不超过 1 cm 即可达到最大峰反射率 90% 以上, 将厚度设为 10 mm (8 层)。

Cu(220)垂直聚焦曲率 $R0(2)$ 与强度的关系模拟结果见图 3。最佳曲率值 $R0(2)=0.44796\text{ m}^{-1}$ 。由图

3, 单色器垂直聚焦曲率对 neutron 强度影响较大。因为单色中子束的分辨率和束流的垂直发散度无关^[3], 垂直曲率变化并不影响谱仪的分辨率。要改善分辨率必须配合使用准直系统。

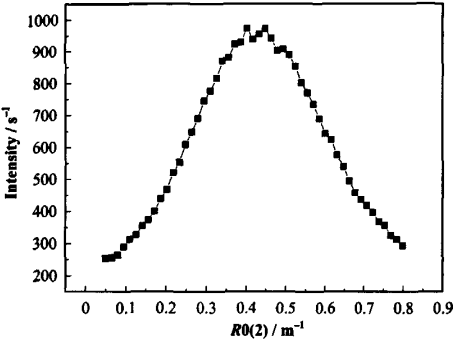


图 3 Cu(220)垂直聚焦曲率与强度的关系曲线样品 α -Fe(211) ($2\theta_s=90^\circ$)
Fig.3 Variation of intensity of α -Fe(211) reflection ($2\theta_s=90^\circ$) with vertical bending curvature for Cu(220) monochromator.

对于完美晶体双聚焦单色器 Si(311), 先对垂直聚焦曲率 $R0(2)$ 扫描确定最佳的 $R0(2)=0.5551\text{ m}^{-1}$, 再对水平聚焦曲率 $R0(1)$ 扫描得到最佳 $R0(1)=0.17347\text{ m}^{-1}$ (对应最大的品质因子 FoM)。由图 4 所示结果, 水平曲率 $R0(1)$ 对强度和分辨率都有较大影响, 调整水平曲率可明显改善 FoM。

2.3 完美晶体双聚焦和镶嵌晶体垂直聚焦单色器比较

按照上述参数设置, 两种类型的单色器均可得到波长为 $1.6549\text{ \AA}$ 的单色中子束。在单色器均为对称衍射几何 SD、聚焦曲率已优化的条件下, 模拟计算得到完美晶体双聚焦和镶嵌晶体垂直聚焦两种单色器对应的衍射峰, 结果见图 5。

对衍射峰进行高斯拟合, 得衍射峰半高宽 FWHM, 按式(2)计算原子面间距 d 的分辨能力 $\Delta d/d$ 。

$$\Delta d/d=\Delta\theta\cot\theta\tag{2}$$

其中, $\Delta\theta$ 为衍射峰半高宽的一半(rad), θ 为散射角的一半($^\circ$)。

两种方案性能结果对比见表 2。

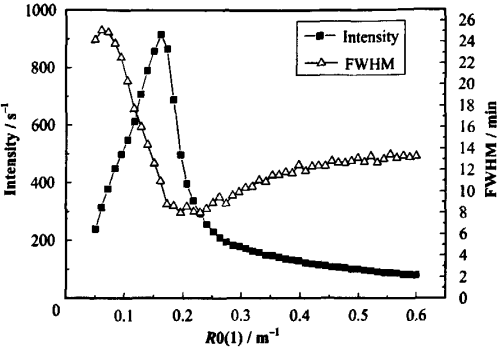


图 4 Si(311)水平聚焦曲率与强度和分辨率的关系曲线样品 α -Fe(211) ($2\theta_s=90^\circ$)

Fig.4 Variation of intensity and FWHM of α -Fe(211) reflection ($2\theta_s=90^\circ$) with horizontal bending curvature for Si(311) monochromator.

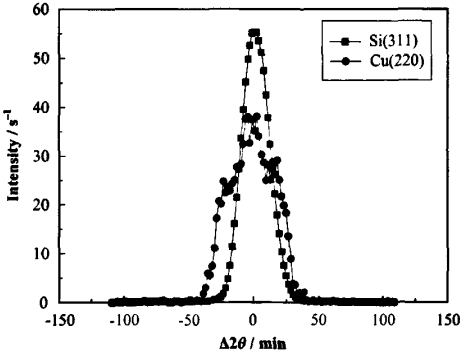


图 5 完美晶体双聚焦 Si(311)和镶嵌晶体垂直聚焦 Cu(220)对应的衍射峰

Fig.5 Diffraction peaks for double focusing perfect crystal Si(311) and vertical focusing mosaic crystal Cu(220).

表 2 两种单色器方案性能对比
Table 2 Comparison between two monochromator schemes.

单色器方案 Type	水平聚焦曲率 $R0(1)/\text{m}^{-1}$	垂直聚焦曲率 $R0(2)/\text{m}^{-1}$	中子强度 I/s^{-1}	衍射峰半高宽 FWHM / '	分辨能力 $\Delta d/d/\%$	品质因子 FoM
Si(311)	0.17347	0.5551	874.06	21.047	0.3061	1.973
Cu(220)	—	0.44796	958.79	38.132	0.555	0.659

从表 2 结果可知, 镶嵌晶体垂直聚焦单色器 Cu(220)的品质因子仅为完美晶体双聚焦单色器 Si(311)的三分之一左右, 后者的性能更好。另外,

完美晶体双聚焦单色器 Si(311)的分辨率更好, 可满足高精度应力测量需要。

3 结论

本文采用了最新发展的蒙特卡罗射线追踪程序对中子衍射应力分析谱仪完美晶体双聚焦单色器和镶嵌晶体垂直聚焦单色器的性能作了模拟比较。研究结果表明:几种单色器衍射几何中,对称衍射SD的效果最好;调节单色器水平聚焦曲率不仅改变谱仪强度,还可以获得不同的分辨率以满足不同精度的测量需要;选用完美晶体双聚焦单色器时谱仪的品质因子FoM大幅度提高,强度与分辨率更加均衡。

参考文献

- 1 Moon Myung Kook, Lee Chang Hee, Em V T, *et al.* Physica B, 2005, 369: 1-7
- 2 郭立平, 李际周, 孙凯, 等. 原子能科学技术, 2008, 42(1): 72-76
GUO Liping, LI Jizhou, SUN Kai, *et al.* Atomic Energy Science and Technology, 2008, 42(1): 72-76
- 3 丁大钊, 叶春堂, 赵志祥, 等. 中子物理学—原理、方法与应用. 北京: 原子能出版社, 2001. 748-754

DING Dazhao, YE Chuntang, ZHAO Zhixiang, *et al.* Neutron physics—Principal, methods and application. Beijing: Atomic Energy Press, 2001. 748-754

- 4 Kimura H, Kiyanagi R, Kojima A, *et al.* Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A, 2002, 482: 799-805
- 5 肖洪文. 中子单色器晶体的模型、性能和生产检测工艺的研究. 博士论文. 北京: 中国原子能科学研究院, 2006
XIAO Hongwen. Investigation on neutron monochromator. PhD Dissertation. Beijing: China Institute of Atomic Energy, 2006
- 6 <http://neutron.ujf.cas.cz/restrax>
- 7 Moon Myung Kook, Lee Chang Hee, Em V T, *et al.* Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A, 2005, 545: 480-489
- 8 陈华, 黄朝强, 孙光爱, 等. 核电子学与探测技术, 2010, 30(3): 374-379
CHEN Hua, HUANG Chaoqiang, SUN Guangai, *et al.* Nucl Electron Detect Technol, 2010, 30(3): 374-379
- 9 Freund A K. Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A, 1985, 238: 570-571

Simulation on monochromators of double focusing perfect crystal and vertical focusing mosaic crystal

CHEN Yanzhou SUN Guangai HUANG Chaoqiang CHEN Bo

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

Abstract In order to satisfy both high flux and high resolution of residual stress neutron diffractometer, the monochromator was simulated using Monte Carlo simulation code SIMRES. A series of factors, including the diffraction geometries (symmetric diffraction, asymmetric diffraction and fully asymmetric diffraction), focusing conditions (vertical and horizontal focusing curvatures) and crystal types (perfect crystal and mosaic crystal), were considered in the simulation to study, taking the figure of merit (FoM) as a comparison measure, the influences of flux on resolution of the diffractometer. The results show that use of symmetric diffraction and perfect crystal double focusing could achieve the best performance.

Key words Monte Carlo simulation, Residual stress neutron diffractometer, Focusing monochromator, SIMRES
CLC O571.56