

应力测量中子衍射谱仪聚焦单色器的模拟

郭立平^{1,2}, 李际周¹, 孙 凯¹, 李峻宏¹, 陈东风¹

(1. 中国原子能科学研究院 核物理研究所, 北京 102413;

2. 武汉大学 物理科学与技术学院, 湖北 武汉 430072)

摘要:为提高样品处入射中子束强度,满足高分辨和小体积标样测量的需要,应用 MCSTAS 软件对中国先进研究堆上应力测量中子衍射谱仪的核心部件垂直聚焦单色器进行模拟和优化设计,得到了单色器在不同起飞角下的最佳聚焦条件,即所需的曲率半径和相邻单晶条之间的最佳倾角。在此条件下,可获得相对于平板单色器 6~7 倍的强度增益,样品处中子注量率达 $10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 以上。在使用聚焦单色器的情形下,对标准的 $\alpha\text{-Fe}$ 多晶样品在无应变、拉应变和压应变下的(211)衍射峰进行了模拟。结果表明:该谱仪的分辨水平至少能测量 $500 \mu\epsilon$ 以上的应变,且应变测量最高精度约为 $20 \mu\epsilon$ 。

关键词:聚焦单色器;蒙特卡罗模拟;中子衍射;应力;MCSTAS 软件

中图分类号:TL817.3;O242.2 文献标志码:A 文章编号:1000-6931(2008)01-0072-05

Simulation Study on Focused Monochromator of Neutron Diffractometer for Stress Measurement

GUO Li-ping^{1,2}, LI Ji-zhou¹, SUN Kai¹, LI Jun-hong¹, CHEN Dong-feng¹

(1. *Department of Nuclear Physics, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China;*

2. *Department of Physics, Wuhan University, Wuhan 430072, China*)

Abstract: In order to improve the incident neutron fluence rate at the sample position to allow both high-resolution and small sampling volume measurements, simulation and optimization on the vertical focusing monochromator, a key component of the neutron diffractometer for strain measurement to be built at China Advanced Research Reactor (CARR) was carried out using the MCSTAS code. The optimal focusing conditions, i. e. curvature radii and the tilting angle of the neighbor crystal slabs for the (511), (311) and (711) reflections under the take-off angles of 60° , 90° and 120° , were obtained. A neutron fluence rate of above $10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ at sample position, which means an intensity gain of about 6-7 relative to flat monochromator, can be achieved under these optimal conditions. To test the optimal design of the vertical focusing monochromator, (211) diffraction patterns of $\alpha\text{-Fe}$ sample, with no strain, tensive strain and compressive strain, respectively, were simulated. The simulated full width at half maximum

of the diffraction pattern and the correspondent peak shift induced by the strain are in good accordance with the results obtained from analytical calculations. It shows that the diffractometer is at least capable of measuring the strain of above $500 \mu\epsilon$ and the highest precision of strain measurement is about $20 \mu\epsilon$.

Key words: focusing monochromator; Monte-Carlo simulation; neutron diffraction; stress; MCSTAS code

垂直聚焦中子单色器可将 $10\sim 30$ cm 高的垂直发散的入射束中子聚焦至样品处的 $2\sim 5$ cm 高,与平板单色器相比,样品处中子注量率可提高 $3\sim 7$ 倍^[1-2]。自 20 世纪 70 年代以来,聚焦单色器技术在各种中子散射谱仪中得到了广泛的应用^[3-4]。正在研制的安装在中国先进研究堆(CARR)上的应力测量用中子衍射谱仪^[5]拟采用垂直聚焦技术,使得聚焦后样品处中子注量率提高到 $10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 以上,满足高分辨率和小体积标样衍射测量的需要。中子束的聚焦技术是该谱仪的核心技术之一,而中子聚焦单色器的设计和研制是其关键。但迄今为止,聚焦单色器仍属不定型产品,需要根据所在谱仪的特点专门设计研制。由于聚焦单色器造价昂贵,工艺复杂,研制周期长,难度大,为避免设计失误,优化谱仪性能,用射线追迹方法对聚焦单色器物理设计方案进行了模拟和优化研究,并与使用平板单色器进行了比较,计算了强度增益。为检验聚焦单色器和整个谱仪的设计方案,本工作用标准的 $\alpha\text{-Fe}$ 多晶样品进行模拟研究。

1 聚焦单色器模型

该谱仪的中子传输路径示于图 1,有关参数详情参见文献^[5]。

谱仪采用垂直聚焦 Ge 单色器,几何尺寸为宽 5 cm、高 20 cm,使用(hhl)晶面簇中的多个晶面为反射面,且以(511)为主反射面(即晶体取向为(511)晶面与表面平行),高度方向为

[0-11]方向,水平嵌镶为 $20'$,起飞角可在 $60^\circ\sim 120^\circ$ 之间连续变化,以选择不同的波长。整个单色器由 20 个长 5 cm、宽 1 cm、厚 1 cm 的单晶条纵向排列(即沿[0-11]方向排列),并逐渐弯曲构成,通过调节弯曲角度,即相邻单晶条之间的倾角 ϕ 来调节单色器的曲率半径 R ,使入射中子束聚焦于样品处。为便于转动单晶条以调节倾角,相邻单晶条间留 0.5 mm 间隔。通过绕垂直轴转动单色器一定角度 ω 来改变反射面,可得到 0.08~0.3 nm 间连续变化的不同波长的单色中子。通过模拟研究确定使用(511)、(311)和(711)反射面分别在 60° 、 90° 和 120° 起飞角下使中子束聚焦于距单色器 1.6~2 m 的样品位置处所需的单色器曲率半径和对应的单晶条之间的最佳倾角。

模拟研究采用通用中子散射模拟软件平台 MCSTAS^[6],并编写了基于 MCSTAS 的 META 语言程序,用于单色器和谱仪的模拟计算。使用 MCSTAS 中的 Single_crystal 模块模拟单色器中的各单晶条,并按以上描述将单晶条组合成垂直聚焦单色器。取[0-11]晶向,即垂直向上方向为模块的 y 轴方向, z 轴方向在[511]面内(图 2)。Ge 单晶的晶格常数 $a=b=c=0.56575$ nm, a, b, c 3 个晶轴矢量在 (x, y, z) 坐标系统中的分量分别为: $a_x=5.4439, a_y=0, a_z=1.5398; b_x=1.0888, b_y=-4.0004, b_z=-3.8494; c_x=1.0888, c_y=4.0004, c_z=-3.8494$ 。Single_crystal 模块将模拟对象当作 1 个实际晶体对待(算法

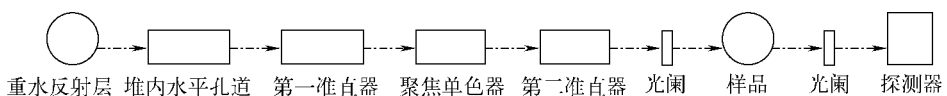


图 1 CARR 应力测量中子衍射谱仪的中子传输路径示意图

Fig. 1 Neutron transmission path for neutron diffractometer for stress measurement at China Advanced Research Reactor

过程参见文献[7]和[8]),根据反射面结构因子、晶胞体积、晶体尺寸和嵌镶度,计算相干散射截面,并考虑晶体对中子的吸收和非相干散射,使模拟尽可能接近实际情况。

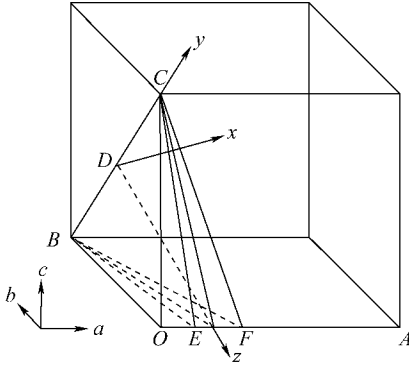


图2 Ge单色器的晶体学坐标与MCSTAS软件的Single_crystal模块中 (x, y, z) 坐标的关系

Fig. 2 Crystallography coordination of Ge monochromator and (x, y, z) coordination in module "Single_crystal" of MCSTAS
z轴在(511)晶面内;BCF晶面在(311)晶面内;
BCE晶面在(711)晶面内

2 模拟结果和讨论

模拟研究假定,反应堆水平孔道入口处中子能谱服从Maxwell分布,中子温度为323 K,总热中子注量率为 $8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,这是CARR设计的在满功率运行下堆芯反射层处最大未扰热中子注量率。图3和表1示出了使用(511)反射面且起飞角 $2\theta_M$ 分别为 60° 、 90° 和 120° 情况下,距单色器1.6 m和2.0 m的样品位置处的中子注量率随单晶条之间倾角变化的模拟结果。可见,当使用不同的起飞角和样品到单色器距离时,聚焦倾角发生了很大的变化,1.6 m处 60° 、 90° 和 120° 起飞角对应的聚焦倾角分别为 0.51° 、 0.35° 和 0.29° ;2.0 m处分别为 0.42° 、 0.30° 和 0.24° 。因此,改变单色器起飞角时,单晶条倾角必须同时作出调整,否则,将显著损失中子束强度,这就要求研制并使用可调焦距而非固定焦距的聚焦单色器。这个结果得出一重要启示:从实验操作的难易程度上考虑,当需要改变中子波长时,最好是保持起飞角不变,而通过旋转单色器使用不同的反射面来实现,这样可避免调节单色器倾角和移动样

品台及探测器。

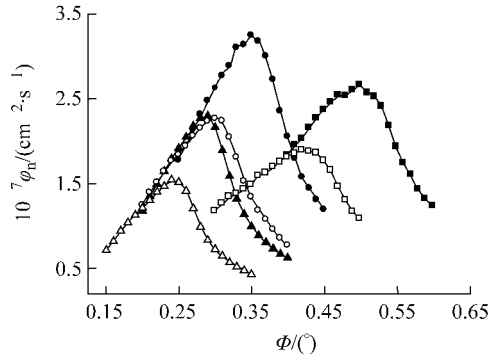


图3 单晶条倾角对样品处中子注量率的影响
Fig. 3 Effect of tilting angle between crystal slabs on neutron fluence rate at sample position

■—— $2\theta_M=60^\circ, d=1.6 \text{ m}$; ●—— $2\theta_M=90^\circ, d=1.6 \text{ m}$;
▲—— $2\theta_M=120^\circ, d=1.6 \text{ m}$; □—— $2\theta_M=60^\circ, d=2.0 \text{ m}$;
○—— $2\theta_M=90^\circ, d=2.0 \text{ m}$; △—— $2\theta_M=120^\circ, d=2.0 \text{ m}$

表1 使中子束聚焦于样品处所需
聚焦单色器曲率半径R和相邻单晶条倾角 Φ
Table 1 Required curvature radius and tilting angle
of adjacent crystal slabs for focused monochromator

d/m	$2\theta_M/(\circ)$	λ/nm	$\Phi_{\text{模拟}}/(\circ)$	$\Phi_{\text{解析}}/(\circ)$	$R_{\text{模拟}}/\text{cm}$	$R_{\text{解析}}/\text{cm}$
1.6	60	0.108 86	0.51	0.444	112.3	129.0
	90	0.153 95	0.35	0.314	163.7	182.4
	120	0.188 55	0.29	0.256	197.6	223.5
2.0	60	0.170 58	0.42	0.372	136.4	153.8
	90	0.241 21	0.30	0.263	197.6	217.5
	120	0.295 42	0.24	0.215	217.5	266.4

表1中同时列出了使用文献[1]中的解析方法的模拟计算结果,计算公式为:

$$\frac{1}{L_0} + \frac{1}{L_{\text{im}}} = \frac{2\sin\theta_M}{R} \quad (1)$$

式(1)是在假定中子源为点源、且将聚焦单色器看成凹面镜的前提下所作的近似处理。式中: L_0 为源距即中子源到单色器距离; L_{im} 为像距即单色器到聚焦点距离; θ_M 为单色器布拉格角。曲率半径的 $R_{\text{模拟}}$ 小于 $R_{\text{解析}}$ 。这可定性解释如下:模拟时,中子虽从堆内孔道入口处发出,但经第一准直器限制后方达到单色器上,单色器所“看到”的中子是从第一准直器发出的,“有效”源位于堆内孔道入口和第一准直器之间,相应地, L_0 模拟值应比解析方法的小;解析

计算中认为聚焦成像为理想的点,而模拟计算中考虑了聚焦束的实际高度,因此, R 模拟值也比解析方法小,对应的 ϕ 模拟值则比解析方法的大。

为与解析方法作进一步比较,将单色器的聚焦倾角 ϕ 采用 $\phi_{\text{解析}}$, 距离单色器 1.6 m 和 2.0 m 的样品处的中子束强度分布的模拟结果显示于图 4, 单色器起飞角 $2\theta_M = 90^\circ$ 。可见, 解析近似下所求的聚焦倾角或曲率半径并非最佳聚焦条件, 聚焦倾角采用 $\phi_{\text{模拟}}$ 比采用 $\phi_{\text{解析}}$ 可使样品处强度分别提高 13% 和 17% (图 4)。

在上述聚焦条件下, 距单色器 1.6 m 的样品处垂直方向的中子束尺寸(按中子束强度分布的半高宽计算)为 3.2 cm, 而若使用通常的平板单色器则为 24 cm, 故束高压缩了 7.5 倍(图 4a)。在束中心附近 8 mm 范围内, 使用垂直聚焦单色器获得相对于平板单色器的强度增益 ρ 约为 7.1 倍, 而用解析方法^[2]算得的强度增益值为 7.4 倍。在样品距单色器 2.0 m 情况下, 使用平板单色器时, 样品处中子束高为 27 cm, 使用垂直聚焦单色器后, 束高压缩到 3.8 cm (图 4b), 获得相对于平板单色器的强度增益 ρ 约为 6.1 倍, 解析计算值为其 6.2 倍, 二者极为接近。可见, 在堆芯反射层处最大未扰热中子注量率为 $8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 时, 使用垂直聚焦单色器可将样品处的中子注量率提高到 $10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 以上(图 3), 可达到设计指标。

为检验聚焦单色器和整个谱仪的设计方

案, 采用标准的 $\alpha\text{-Fe}$ 多晶样品进行模拟研究, 获得了样品在无应变、 $500 \mu\epsilon$ 的拉应变和压应变 ($\Delta d/d = 5 \times 10^{-4}$) 下的 (211) 模拟衍射峰(图 5), 标样尺寸为 $8 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$ 。单色器反射面为 Ge (511), 起飞角 90° , 中子波长为 0.15395 nm , 第一、第二准直器的水平发散度分别为 $10'$ 和 $30'$, 样品距离单色器 1.6 m, 探测器距样品 1 m。采用高斯峰形对衍射峰进行峰形拟合, 得到 3 个峰的峰位分别在 $82.145(1)^\circ$ 、 $82.098(1)^\circ$ 和 $82.195(2)^\circ$, 半高宽分别为 $0.202(2)^\circ$ 、 $0.202(3)^\circ$ 和 $0.205(3)^\circ$ 。拉应变和压应变引起的衍射峰位移分别为 -0.047° 和 0.050° , 与期望值 -0.050° 和 0.051° 符合较好。

用文献[9]中给出的近似方法计算了谱仪的分辨率, 并根据文献[10]中的方法对垂直聚焦引起的发散进行了修正。结果表明: 在 82° 的衍射角附近, 谱仪的分辨率最高, 对应的半高宽值为 0.192° 。这一结果与上述模拟结果符合较好。

从模拟衍射谱图上可清楚地看出峰的位置, 表明谱仪的分辨水平对于测量 $500 \mu\epsilon$ 以上的应变是能够胜任的。文献[11]指出, 若在半高宽范围内测量约 10 个数据点, 通过拟合可使衍射峰的定位精度提高 1 个数量级, 达到半高宽的 1/100。对于上述 0.2° 的半高宽, 拟合精度约为 0.002° , 与这里上述拟合结果一致, 其对应的应变误差为 $\Delta d/d = (\Delta(2\theta)/2) \text{ctg } \theta \approx 2.0 \times 10^{-5}$, 即 $20 \mu\epsilon$ 。由于谱仪的最高角分辨

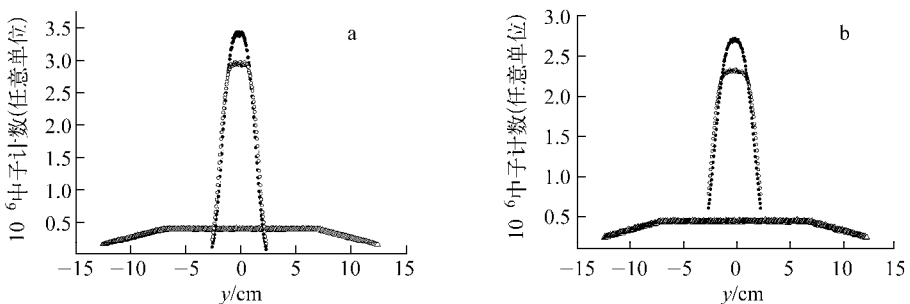


图 4 使用平板单色器和聚焦单色器时距单色器 1.6 m(a)和 2.0 m(b)的样品处垂直方向的中子束强度分布

Fig. 4 Neutron intensity distribution along vertical direction at sample position, 1.6 m (a) and 2.0 m (b) away from monochromator

a: ●——聚焦单色器, $\phi = \phi_{\text{模拟}} = 0.35^\circ$; ○——聚焦单色器, $\phi = \phi_{\text{解析}} = 0.314^\circ$; △——平板单色器
 b: ●——聚焦单色器, $\phi = \phi_{\text{模拟}} = 0.30^\circ$; △——聚焦单色器, $\phi = \phi_{\text{解析}} = 0.263^\circ$; ○——平板单色器

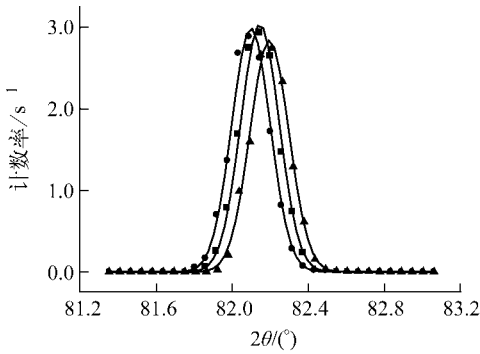


图5 α -Fe 样品分别在无应变、拉应变和压应变下的(211)模拟衍射峰

Fig. 5 Simulated (211) diffraction peak of α -Fe sample under no-strain, tensile strain and compressive strain

■——无应变; ●——拉应变; ▲——压应变

约 0.2° , 因此, 对应的 $20 \mu\epsilon$ 应变误差可视为谱仪最小的应变测量误差。这样, 通过对标准样品的模拟研究检验了设计方案的可行性, 并给出了该谱仪可达到的应变测量精度。

3 结论

本文对应力测量中子衍射谱仪上的核心部件聚焦单色器进行了模拟和优化设计, 获得了聚焦单色器的聚焦曲率半径、样品处中子束强度分布和注量率。结果表明, 通过优化设计可使样品处中子注量率提高 $6 \sim 7$ 倍, 达到 $10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 以上。用标准的 α -Fe 多晶样品进行的模拟研究表明, 谱仪的分辨水平对于测量 $500 \mu\epsilon$ 以上的应变是能够胜任的, 应变测量最高精度约为 $20 \mu\epsilon$ 。

感谢 Farhi E 博士和成之绪研究员的有益讨论和模拟软件使用方面的帮助以及勾成研究员、张百生研究员和赵志祥研究员在谱仪设计方面的合作和支持。

参考文献:

[1] RISTE T. Singly bent graphite monochromators

for neutrons[J]. Nuclear Instruments and Methods, 1970, 86(1):1-4.

[2] CURRAT R. The efficiency of vertically bent neutron monochromators[J]. Nuclear Instruments and Methods, 1973, 107(1):21-28.

[3] AXE J D, CHEUNG 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.

[4] NUNES A C, SHIRANE G. Vertically bent pyrolytic graphite crystals applied to triple-axis neutron spectrometry[J]. Nuclear Instruments and Methods, 1971, 95(3):445-452.

[5] 李际周, 郭立平. 中国先进研究堆中子散射谱仪概念设计报告: 应力测量中子衍射谱仪, CARRNS-009[R]. 北京: 中国原子能科学研究院, 2003.

[6] LEFMANN K, NIELSEN K. MCSTAS: A general software package for neutron ray-tracing simulations[J]. Neutron News, 1999, 10(3):20-23.

[7] NIELSEN K, LEFMANN K. User and programmers guide to the neutron ray-tracing package; MCSTAS, Version 1.4[R]. Roskilde: Risø National Laboratory, 2000: 72-79.

[8] SQUIRES G L. Introduction to the theory of thermal neutron scattering[M]. London: Cambridge University Press, 1978:37-42.

[9] CAGLIOTI G, PAOLETTI A, RICCI F. Choice of collimators for a crystal spectrometer for neutron diffraction[J]. Nuclear Instruments, 1958, 3(2):223-228.

[10] HEWAT A W. Design for a conventional high-resolution neutron powder diffractometer[J]. Nuclear Instruments and Methods, 1975, 127(3): 361-370.

[11] HUTCHINGS M T, KRAWITZ A D. Measurements of residual and applied stress using neutron diffraction[M]. Berlin: Kluwer Academic publishers, 1992: 285-296.