

# 三角形弯晶单色器的分光及聚焦特性研究

郑文莉 姜晓明 武家扬 景毓辉 刘功淳

(中国科学院高能物理研究所 北京 100039)

1994-07-13 收稿

## 摘 要

北京同步辐射装置 (BSRF) 的 4W1C 光束线用斜切角为  $12.16^\circ$  的三角形 Si(111)、Si(220) 和 Si(422) 晶体在衍射角为  $23.65^\circ$  时选择 0.252nm、0.154nm 和 0.089nm 波长的单色 X 光。三角形晶体压弯成柱面, 可实现单色光水平方向的聚焦, 为漫散射实验站提供聚焦的单色 X 光。解析计算和 SHADOW 软件包进行追踪的结果与实验测试结果符合得很好。

**关键词** 同步辐射, 弯晶单色器, 光路追迹, X 射线漫散射。

## 1 引 言

同步辐射光是高能电子在储存环中作圆周运动时, 沿着轨道的切线方向发出的电磁波。与一般光源相比, 同步辐射光源具有通量大、亮度高、频谱宽且连续可调、高度的准直性、偏振度并具有脉冲时间结构等特点, 为众多学科的实验研究提供了强有力的工具<sup>[1]</sup>。同步辐射光在物质结构研究领域, 对原子结构以上各个层次的研究都起着非常重要的作用。

在同步辐射应用研究中, 各种不同的反射镜和晶体单色器是重要的束线光学仪器设备。反射镜具有偏转、聚焦以及滤波等多种功能。同步辐射实验中的样品远离光源点, 在 10m 外的样品处 X 射线束的水平宽度可达 100—200mm (水平接收角为 1—2mrad), 竖直尺寸约为 3mm (垂直方向本征发散度 0.3mrad 左右)。通过不同形状的曲面镜聚焦就可以将光源点成象在焦点处以获得高光密度来满足各种研究的需要。晶体单色器用来从同步辐射的连续谱中选择一定的波长并可对一定的波长范围进行扫描。晶体分为平晶与弯晶两种: 平晶利用晶体 Bragg 衍射进行光的单色化,  $(n, -n)$  排列的双平晶单色器还可以用来固定光束的出口, 使束线便于排列。弯晶单色器不仅使同步光单色化, 而且还可起到聚焦的作用, 兼有反射镜和平晶的特点。

世界上许多同步辐射实验室都建立了采用弯晶进行单色和聚焦的光束线, 开展不同方面的实验研究工作<sup>[2-7]</sup>。北京同步辐射装置 (BSRF) 的 4W1C 是一条与 4W1B 光束线分时使用的分支束线<sup>[8,9]</sup>。它采用斜切三角形弯晶单色器对同步光进行水平偏转、聚焦和

单色化, 此光束对光源的接收角为  $4.0(H) \times 0.23(V)\text{mrad}^2$ , 光源点到弯晶单色器距离为 13.8m, 聚焦点到弯晶距离为 4.7m; 用斜切角为  $12.16^\circ$  的三角形 Si(111)、Si(220)、Si(422) 晶体分别选择波长为 0.252nm、0.154nm、0.089nm 的单色 X 光。柱面镜实现垂直方向的聚焦并抑制高次谐波, 为漫散射实验站提供双聚焦的单色光进行晶体衍射和漫散射实验。

本文分别从晶体 X 射线光学及衍射理论的解析计算和 SHADOW<sup>[10]</sup> 程序光路追迹, 研究了三角形弯晶单色器的分光及聚焦特性。实验测试得到的结果与计算和模拟的结果符合得很好。

## 2 理论计算

由于采用的单色器必须同时实现单色化和不对称聚焦(即物距  $\neq$  象距), 一个衍射面与晶体表面有一定斜切角的柱面弯曲晶体, 是一个十分理想的选择。根据弹性力学, 三角形的晶体可以弯曲成柱面, 而方形薄片的弯曲会在晶体边缘产生拱翘<sup>[6,9]</sup>。下面从 X 光光学和衍射理论, 来计算满足要求的弯曲晶体单色器的参数。

### 2.1 晶体斜切角 $\alpha$ 的确定

如图 1 所示, 对一个柱面弯曲的斜切晶体, 从点源 S 发出的 X 光在晶体表面 A、O 二点处入射角的差别为<sup>[11]</sup>:

$$\delta\theta = (L/2)[\sin(\theta - \alpha)/P' - \sin(\theta + \alpha)/P], \quad (1)$$

这里 L 是 A 和 O 间的距离; P 是光源点到单色器的距离; P' 是聚焦点到单色器的距离。相同波长的 X 射线在晶体表面不同点同时发生衍射时有  $\delta\theta = 0$ , 即

$$\sin(\theta - \alpha)/P' = \sin(\theta + \alpha)/P, \quad (2)$$

此即 Guinier 条件<sup>[11]</sup>。由(2)式得到斜切角计算公式为:

$$\alpha = \text{tg}^{-1}[(P - P')/(P + P')\text{tg}\theta], \quad (3)$$

在 4W1C 光束线上,  $P = 13.8\text{m}$ ,  $P' = 4.7\text{m}$ ,  $\theta = 23.65^\circ$ , 得到  $\alpha = 12.16^\circ$ 。

### 2.2 晶体的曲率半径 R

如果晶体使相同波长的 X 射线从一个点光源衍射汇聚到一个焦点, 那么晶体的曲率 R 半径必须满足方程<sup>[11]</sup>

$$2/R = \sin(\theta - \alpha)/P' + \sin(\theta + \alpha)/P, \quad (4)$$

即光源点和聚焦点位于 Rowland 圆上。对 4W1C 光束线, 得到  $R = 23.59\text{m}$ 。

### 2.3 衍射光束的发散度和象斑尺寸

弯晶单色器在垂直方向没有聚焦功能, 因此衍射光束的垂直发散度不会改变, 束斑的垂直尺寸将随同步光的垂直发散度而变化。容易得到出射光束的水平发散度在 Guinier

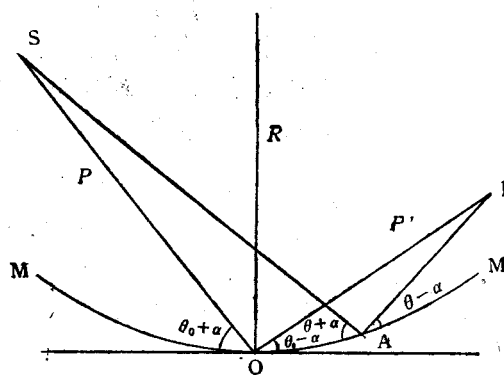


图 1 Guinier 条件示意图<sup>[11]</sup>

MOM'——晶体单色器的晶面, S——光源点, O、A——光束在晶面发生反射的两点, I——聚焦点, R——单色器的曲率半径,  $\theta_0 + \alpha$ ,  $\theta + \alpha$ ——入射光线 SO、SA 与晶面的夹角,  $\theta_0 - \alpha$ ,  $\theta - \alpha$ ——反射光线 OI、AI 与晶面的夹角。

位置为

$$\beta' = L \sin(\theta - \alpha) / P' = \beta. \quad (5)$$

聚焦光斑的水平尺寸  $h'$  如图 2 所示为:

$$h' = hP'/P = 0.34h, \quad (6)$$

$h$  是同步光源的水平尺寸。当北京正负电子对撞机储存环运行在 2.2GeV 电子能量下, 用 SHADOW 软件包追迹得到的光源的水平尺寸 (FWHM) 为  $h = 2.0\text{mm}$ , 则焦斑水平尺寸为 0.68mm.

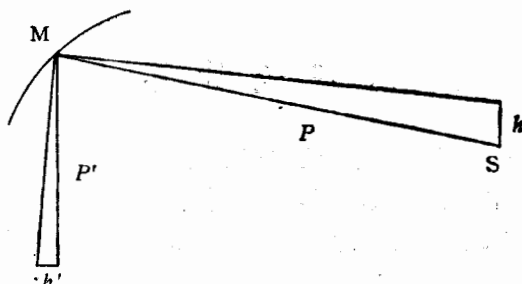


图 2 像的大小

M——单色器, S——光源点, I——聚焦点.

## 2.4 衍射光束的波长(能量)分辨率 $\Delta\lambda/\lambda$

根据 Bragg 定律,由晶体衍射选取的单色光波长分辨率  $\Delta\lambda/\lambda$  为

$$\Delta\lambda/\lambda = \Delta\theta \text{ctg}\theta. \quad (7)$$

在这里,有三个影响  $\Delta\theta$  的因素,分别表征为  $Z_1, Z_2$  和  $Z_3$ .

### 2.4.1 X射线入射到晶体上的接收宽度 $W_{acc}$ 的影响 $Z_1$

当 X 射线以  $\theta_B + \alpha$  角入射到斜切角为  $\alpha$  的晶体表面时,只有在 Bragg 角  $\theta_B$  附近  $W_{acc}$  角范围内的 X 光才可以被晶面反射。 $W_{acc}$  是晶体不对称衍射时的接收宽度<sup>[12]</sup>,

$$W_{acc} = [\sin(\theta - \alpha) / \sin(\theta + \alpha)]^{1/2} W_{sym}. \quad (8)$$

代入 4W1C 光束线的参数,得到  $W_{acc} = 0.58W_{sym}$ , 其中  $W_{sym}$  为晶体正切时的 Darwin 宽度。Si 晶体不对称衍射的接收宽度见表 1, 其中  $W_{sym}$  为由 SHADOW 软件计算得到的晶体对称衍射的 Darwin 宽度, 在这里水平偏振的同步光在三角弯晶单色器衍射过程中是  $\pi$  偏振光。于是

$$Z_1 = W_{acc} \text{ctg}\theta. \quad (9)$$

表 1 三种晶体不对称衍射的接收宽度

	Si(111)	Si(220)	Si(422)
$W_{sym}$ (arcsec)	8.86	3.86	0.97
$W_{acc}$ (arcsec)	5.1	2.2	0.56

2.4.2 晶体弯曲的影响  $Z_2$ 

由图 1 可知,晶体弯曲产生的波长分辨率影响由(1)式给出的  $\delta\theta$  决定

$$Z_2 = \delta\theta \text{ctg}\theta. \quad (10)$$

在 Guinier 条件下,  $\delta\theta = 0$ ,  $Z_2 = 0$ .

2.4.3 光源水平尺寸的影响  $Z_3$ 

由图 2 可知,

$$Z_3 = (h/P)\text{ctg}\theta, \quad (11)$$

由  $h = 2.0\text{mm}$ , 得到  $Z_3 = 3.39 \times 10^{-4}$ . 这是影响波长分辨率的最大因素.

这样得到弯晶单色器的波长分辨率为

$$\Delta E/E = (Z_1^2 + Z_2^2 + Z_3^2)^{1/2}. \quad (12)$$

对三种不同 Si 晶体得到的波长分辨率列于表 2 中,由此可见,光源的水平尺寸限制了三角弯晶单色器的波长分辨率.

表 2 三种晶体可得到的能量分辨率

	Si(111)	Si(220)	Si(422)
$Z_1$	$5.7 \times 10^{-5}$	$2.5 \times 10^{-5}$	$6.3 \times 10^{-6}$
$Z_2$	0	0	0
$Z_3$	$3.39 \times 10^{-4}$	$3.39 \times 10^{-4}$	$3.39 \times 10^{-4}$
$\Delta E/E$	$3.43 \times 10^{-4}$	$3.40 \times 10^{-4}$	$3.39 \times 10^{-4}$

### 3 SHADOW 软件光路追踪

SHADOW 是同步辐射束线光学通用的光路追踪计算机软件. 它基本上可以对任何一个光学系统进行计算机实验, 可以获得像的尺寸、波长分辨率、功率密度等我们所关心的信息, 是检验一个光学系统的有力手段<sup>[10]</sup>.

在对 Si(220) 晶体进行的追迹中, 选取的 X 光波长为  $0.154\text{nm}$ , SHADOW 软件生成的光源的水平尺寸 ( $FWHM$ ) 约为  $2.0\text{mm}$ ; 经三角弯晶聚焦后追迹得到的光斑如图 3(a) 所示, 其水平尺寸 ( $FWHM$ ) 约为  $0.6\text{mm}$ , 为原光源尺寸的  $3/10$ . 焦点处的能谱分布如图 3(b), 可获得的能量分辨率为  $3.7 \times 10^{-4}$ . 作为比较, 平晶单色器情况下的参数为: 在  $4.7\text{m}$  处光斑水平尺寸 ( $FWHM$ ) 为  $70.2\text{mm}$ , 能量分辨率为  $4.3 \times 10^{-3}$ . 由此可见, 三角弯晶单色器将使 X 光密度增大 100 倍.

另两种斜切晶体在聚焦系统下追迹得到与 Si(220) 同样的聚焦光斑尺寸, 波长的分辨率为: Si(111) 在波长  $0.252\text{nm}$  时为  $4.1 \times 10^{-4}$ , Si(422) 在波长  $0.089\text{nm}$  时为  $3.6 \times 10^{-4}$ .

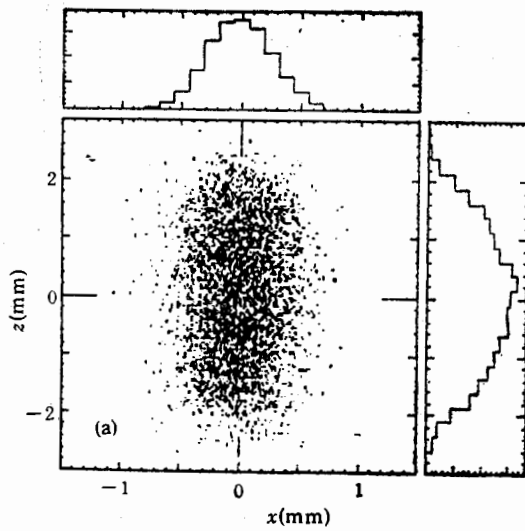


图 3(a) 聚焦光斑的像

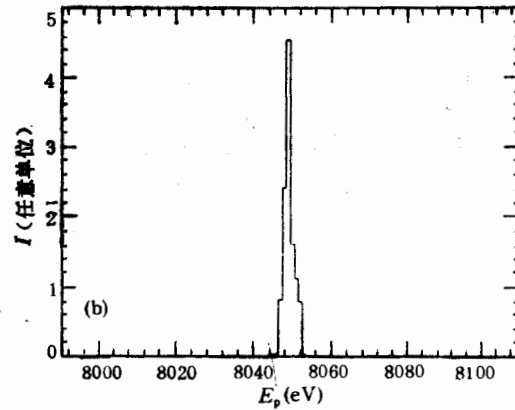


图 3(b) 聚焦光斑的能谱分布

$I$ ——强度,  $E_p$ ——光子能量.

#### 4 实验测试结果

在同步辐射专用光期间,对 4W1C 光束线聚焦后的水平光斑尺寸进行了测量,得到三角弯晶水平聚焦后光斑水平尺寸 ( $FWHM$ ) 为 1.4mm, 水平聚焦效果见图 4.

单色光能量分辨率采用测量晶体衍射的摇摆曲线来获得. 在单色光未经反射镜垂直聚焦的情况下,用垂直方向狭缝可以限制垂直方向的光束发散度为

$$\Gamma = (S + U)/(P + P'), \quad (13)$$

其中  $S$  为狭缝垂直方向尺寸,  $U$  为 4W1C 光束线光源的垂直尺寸. 在垂直狭缝尺寸  $S = 0.1\text{mm}$  的情况下,得  $\Gamma = 7.8''$ . 用五圆衍射仪测量的 Si(333) 晶体对单色光衍射的摇

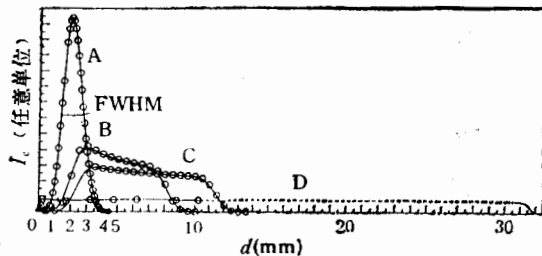


图 4 4W1C 三角弯晶对同步光的水平聚焦效果  
A: 晶体的曲率半径  $R = 23.59\text{m}$ ; B 和 C: 晶体在压弯过程中; D: 晶体未压弯;其中点划线为推理得到.

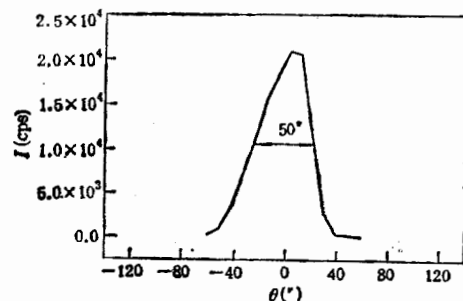


图 5 由漫散射站五圆衍射仪测出的 Si(333) 摇摆曲线

摆曲线见图 5, 其半高全宽为  $50''$ 。Si(333)衍射在  $0.154\text{nm}$  时的 Darwin 宽度为  $\beta = 1.99''$ , 由

$$FWHM = [\Gamma^2 + \beta^2 + (\operatorname{tg}\theta \cdot \Delta\lambda/\lambda)^2]^{1/2}, \quad (14)$$

得到  $\Delta\lambda/\lambda = 4.4 \times 10^{-4}$ 。与理论计算和光学追迹的结果基本吻合。

## 5 结 论

三种斜切角为  $12.16^\circ$  的 Si(111)、Si(220) 和 Si(422) 三角形晶体在衍射角为  $23.65^\circ$  时, 可以分别选择波长为  $0.252\text{nm}$ 、 $0.154\text{nm}$  和  $0.089\text{nm}$  的单色 X 光; 晶体弯曲成曲率半径为  $23.59\text{m}$  的柱面时, 使单色 X 射线聚焦在  $4.7\text{m}$  的样品处。测量得到聚焦光斑的水平尺寸为  $1.4\text{mm}$ , 波长分辨率为  $4.4 \times 10^{-4}$ , 与理论设计值符合得很好。

唐鄂生, 王玉田, 修立松, 李超荣和李明等同志在实验测试中给予了很多指导和帮助, 在此一并表示感谢。

## 参 考 文 献

- [1] Winick, S. Doniach, *Synchrotron Radiation Research*, Plenum Press, New York, (1980).
- [2] J. R. Helliwell et al., *J. Phys.*, **E15**(1982)1363.
- [3] N. Sakabe, *J. Appl. Cryst.*, **16**(1983)542.
- [4] Y. Amemiya, K. Wakabayashi, T. Hamanaka, et al., *Nucl. Instr. Methods* **208**(1983)471.
- [5] R. Caciuff, S. Melone, F. Rustichelli, A. Boeuf, *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)*, **152**(1987)26.
- [6] H. Toleutino, E. Dartyge et al., *J. Appl. Cryst.*, **21**(1988)15.
- [7] Bob Batterman, Ken Finkelstein, Sarjit Shastri, *CHESSE Activity Reports*, (Winter 1993).
- [8] Y. Jing et al., *Rev. Sci. Instrum.*, **63**(1992)1077.
- [9] X. Jiang, Y. Fang, D. Liu, D. Xian, *Proceedings of the International Conference on Synchrotron Radiation Applications*, (USTC Press, 1990) 409.
- [10] B. Lai, F. Cerrina, *Nucl. Instr. and Meth.*, **A246**(1986)337.
- [11] G. Rosenbaum, K. C. Holmes, in *Synchrotron Radiation Research*, edited by H. Winick and S. Doniach, Plenum Press, New York, (1980) p 533.
- [12] B. E. Warren, *X-ray Diffraction*, Addison-Wesley, Reading, Mass, (1969) 353.

## Studies on Focusing Performances of the Bent Crystal Monochromator

Zheng Wenli Jiang Xiaoming Wu Jiayang Jing Yuhui Liu Gongchun

*(Institute of High Energy Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039)*

Received 13 July 1994

### Abstract

The triangular crystal is used as monochromator on 4W1C beamline at Beijing Synchrotron Radiation Facility. Three crystals of Si(111), Si(220) and Si(422) with an oblique-cut angle of  $12.16^\circ$  are employed at the same Bragg angle  $23.65^\circ$  to select monochromatic X-rays with wavelengths of 0.252nm, 0.154nm and 0.089nm, respectively. The triangular crystal is bent to a cylindrical shape to focus the beam in the horizontal direction and to provide focusing monochromatic X-rays for the diffuse scattering station. The theoretic calculations and SHADOW ray-tracing of the optical system are in good agreement with the experimental results.

**Key words** synchrotron radiation, bent crystal monochromator, ray-tracing, diffuse scattering.