

# 双晶单色器束线调试的理论计算

乔山 先鼎昌

(中国科学院高能物理所, 北京 100039)

## 摘 要

本文报道了在北京同步辐射实验室4W1B光束线双晶单色器的安装调试过程中所做的理论计算。给出了单色光强度、能量分辨率及能量的准确性与各个可调整自由度的关系。由计算结果, 提出了合理的双晶单色器调整步骤及各个自由度的调整精度要求。

## 一、引 言

北京正负电子对撞机同步辐射实验室4W1B光束线是一条单色光束线, 采用双晶单色器, 为XAFS实验站提供4—22 keV的单色同步辐射X光束。在它的安装调试过程中, 有必要计算各个几何因素对单色光性能的影响, 从而提出各个自由度的调整精度要求

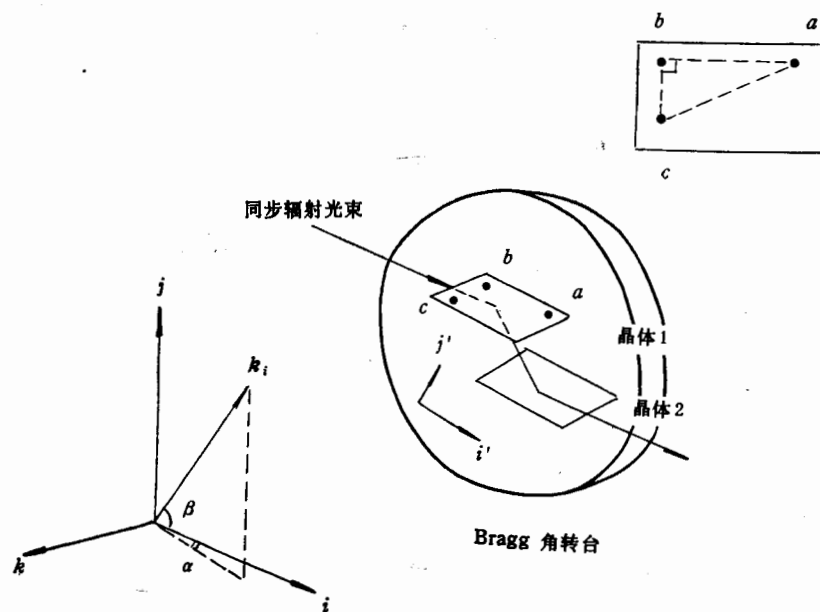


图1 双晶单色器的结构

及调整步骤。本文报道了为这个目的进行的理论分析。理论计算的结果也为更好地使用这条束线及未来新束线的设计创造了一定的有利条件。

典型的双平晶单色器的结构如图1所示。晶体1、2通过晶体支架固定在一个转台上。转台可以绕其转轴  $k$  转动, 转过的角度由轴角编码器记录。通过它的转动, 可以改变入射光束与晶面间的夹角, 即 Bragg 角  $\theta_b$ , 从而改变出射单色光能量  $E$ , 所以, 称这个转台为 Bragg 角转台。对 Si(111) 晶体有关系:

$$E = 1.977 / \sin \theta_b (\text{keV}).$$

为了精确地将两晶体调平行, 晶体支架为晶体提供两个辅助的转动自由度, 即绕  $\bar{bc}$  轴和  $\bar{ab}$  轴的转动, 被称之为投动和滚动, 相应的转角分别被称为投角 (pitch angle) 和滚角 (roll angle)。

## 二、坐标系的选择及几个几何参量的定义

设  $i, j, k$  为实验室坐标系, 令  $k$  为 bragg 角转台转轴的方向,  $i$  为束线的几何安装位置定义的束线方向。设  $i', j'$  为固定在 Bragg 角转台上的坐标系, 当转台转角为零时,  $i', j'$  与  $i, j$  重合。设  $n, g, t$  为固定在晶体上的坐标系,  $n$  为晶体的法线方向,  $g$  为晶体的滚角转动轴 (即  $\bar{ab}$  轴),  $t$  为晶体的投角转动轴 (即  $\bar{bc}$  轴)。

定义  $n$  与  $k$  垂直时的晶体滚角  $\alpha_g$  为零, 这样, 晶体的滚角就是晶面法线与 Bragg 角转台转轴的不垂直度。定义  $n$  与  $i'$  垂直时的晶体投角  $\alpha_t$  为零。很明显, 通过转动 Bragg 角转台可以使第一晶体的法线  $n_1$  与  $i$  垂直。所以, 若定义  $n_1$  与  $i$  垂直时的 Bragg 角转台转角为零, 则因为此时  $i = i'$ ,  $n_1$  就与  $i'$  垂直, 即  $\alpha_{t1} = 0$ 。也就是说, 由于转台转角零点与晶体投角零点的相关性, 总可以调整 Bragg 角转台转角的零点使第一晶体的投角  $\alpha_{t1} = 0$ , 则第二晶体的投角  $\alpha_{t2}$  就是两晶体在投角方向的不平行度。定义  $\alpha_t = 0$  时, 晶体  $g$  轴与  $i'$  的夹角 (即不平行度) 为  $\delta$ , 则  $\delta$  为晶体滚角转动轴的安装误差。由于  $g$  与  $t$  垂直,  $\delta$  也是晶体投角转动轴的安装误差。定义入射到单色器的同步辐射光与  $ik$  面的夹角为  $\beta$ , 其在  $ik$  面上的投影与  $i$  的夹角为  $\alpha$ 。 $\alpha, \beta$  由两部分组成,  $\alpha = \alpha_c + \alpha_d, \beta = \beta_c + \beta_d$ , 其中  $\alpha_c, \beta_c$  是光束中心线与束线的偏离角, 即束线的准直误差。 $\alpha_d, \beta_d$  是光束非准直性引起的光线对光束中心线的偏离角。定义光束的角发散  $\alpha_m, \beta_m$  为光束中光线间  $\alpha, \beta$  之最大差值, 其大小可以被单色器前的狭缝所限制。束线的调试过程就是使  $\delta, \alpha_g, \alpha_t, \alpha_c, \beta_c$  等达到调整精度的要求, 权衡光强与能量分辨率使  $\alpha_m, \beta_m$  达到最佳值的过程。

## 三、晶体法线方向与投角、滚角及转台转角的关系

$\alpha_t = \alpha_g = 0$  时, 固定在晶体上的坐标系

$$\begin{pmatrix} g_0 \\ n_0 \\ t_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \delta^2/2 & 0 & -\delta \\ 0 & 1 & 0 \\ \delta & 0 & 1 - \delta^2/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i' \\ j' \\ k \end{pmatrix},$$

当转台转动角  $\theta$  后,

$$\begin{pmatrix} i' \\ j' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix},$$

晶体绕  $g$  轴转动一滚角  $\alpha_g$  后的  $(g', n', t')$  与转动前的  $(g, n, t)$  间有如下的关系:

$$\begin{pmatrix} g' \\ n' \\ t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha_g & \sin\alpha_g \\ 0 & -\sin\alpha_g & \cos\alpha_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ n \\ t \end{pmatrix} = A_g \begin{pmatrix} g \\ n \\ t \end{pmatrix}.$$

晶体绕  $t$  轴转动一投角  $\alpha_t$  后的  $(g', n', t')$  与转动前的  $(g, n, t)$  满足

$$\begin{pmatrix} g' \\ n' \\ t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha_t & \sin\alpha_t & 0 \\ -\sin\alpha_t & \cos\alpha_t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ n \\ t \end{pmatrix} = A_t \begin{pmatrix} g \\ n \\ t \end{pmatrix}.$$

值得注意的是  $A_t A_g \neq A_g A_t$ , 即投角与滚角的转动次序不同, 晶体法线的最终指向也就不同. 记  $n'_{t}$  和  $n'_{t_g}$  分别为先作投角再作滚角转动及相反次序后所得的晶体法线方向, 在  $\alpha_t, \alpha_g \ll 1$ , 略去 2 次以上小量时有

$$n'_{t_g} = n'_{g_t} = (-\alpha_t, 1 - (\alpha_t^2 + \alpha_g^2)/2, \alpha_g) \begin{pmatrix} g \\ n \\ t \end{pmatrix}.$$

为了简化, 在以后的计算中假设  $\alpha_t, \alpha_g, \delta$  等小量  $\ll 1$ , 并略去 2 次以上小量. 所以, 在转台转动角  $\theta$ , 晶体转动投角  $\alpha_t$  及滚角  $\alpha_g$  后, 单色器两晶体的法线方向

$$\begin{aligned} n_{1,2} &= (-\alpha_t, 1 - (\alpha_t^2 + \alpha_g^2)/2, \alpha_g) \begin{pmatrix} g_0 \\ n_0 \\ t_0 \end{pmatrix} \\ &= \pm(-\sin\theta - \alpha_t \cos\theta + \delta\alpha_g \cos\theta + \sin\theta(\alpha_t^2 + \alpha_g^2)/2, \cos\theta - \alpha_t \sin\theta \\ &\quad - \delta\alpha_g \sin\theta - \cos\theta(\alpha_t^2 + \alpha_g^2)/2, \alpha_g + \delta\alpha_t) \begin{pmatrix} i \\ j \\ k \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1)$$

#### 四、经晶体反射后, 出射光与反射光方向间的关系

方向为  $k_i$  的人射光在法线为  $n$  的晶面上反射后, 出射光方向  $k_f$  满足

$$k_i \times n = k_f \times n;$$

$$k_i \cdot n = -k_f \cdot n.$$

可以证明, 若  $k_i = (a, b, c), k_f = (a', b', c'), n = (n_i, n_j, n_k)$ , 则

$$(a', b', c') = (a, b, c) \begin{pmatrix} 1 - 2n_i^2 & -2n_i n_j & -2n_i n_k \\ -2n_j n_i & 1 - 2n_j^2 & -2n_j n_k \\ -2n_k n_i & -2n_k n_j & 1 - 2n_k^2 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

设入射到单色器的光线  $k_i$  与  $ik$  面的夹角为  $\beta$ , 其在  $ik$  面上的投影与  $i$  的夹角为  $\alpha$ , 则

$$\mathbf{k}_i \approx (1 - (\alpha^2 + \beta^2)/2, \beta, \alpha) \begin{pmatrix} i \\ j \\ k \end{pmatrix} \quad (3)$$

由(2)式可得,此光线在第一晶体上反射后,出射光线

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_f \approx & (\cos 2\theta + \beta \sin 2\theta - \cos 2\theta(\alpha^2 + \beta^2)/2 + 2\alpha_{g1}^2 \sin^2 \theta + 2\alpha\alpha_{g1} \sin \theta \\ & + 2\delta_1 \alpha_{g1} \sin 2\theta, \sin 2\theta - \beta \cos 2\theta - \sin 2\theta(\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha_{g1}^2)/2 \\ & - 2\alpha\alpha_{g1} \cos \theta - 2\delta_1 \alpha_{g1} \cos 2\theta, \alpha + 2\alpha_{g1} \sin \theta - 2\beta\alpha_{g1} \cos \theta) \begin{pmatrix} i \\ j \\ k \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

## 五、计算结果

### 1. 入射光对第一和第二晶体的 Bragg 角之差与各个可调整自由度的关系

由(1)、(3)式可得,入射光线对第一晶体的 Bragg 角为

$$\theta_{b1} = -\sin^{-1}(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{n}_1) = \theta - \beta - \operatorname{tg} \theta ((\alpha^2 + \alpha_{g1}^2)/2) - \alpha\alpha_{g1}/\cos \theta - \delta_1 \alpha_{g1}. \quad (5)$$

由(1)、(4)式可得,被第一晶体反射,入射在第二晶体上的光线对第二晶体的 Bragg 角

$$\begin{aligned} \theta_{b2} = & -\sin^{-1}(\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{n}_2) = \theta - \beta - \alpha_{t2} - \operatorname{tg} \theta (\alpha^2 + \alpha_{g2}^2 + 4\alpha_{g1}^2)/2 + \alpha(\alpha_{g2} \\ & - 2\alpha_{g1})/\cos \theta + 2\alpha_{g1}\alpha_{g2} \operatorname{tg} \theta - 2\delta_1 \alpha_{g1} + \delta_2 \alpha_{g2}. \end{aligned}$$

两 Bragg 角之差

$$\begin{aligned} \Delta\theta_b = & \theta_{b2} - \theta_{b1} = -\alpha_{t2} - (\operatorname{tg} \theta / 2)(\alpha_{g2} - \alpha_{g1})(\alpha_{g2} - 3\alpha_{g1}) \\ & + \cos^{-1} \theta \alpha_c (\alpha_{g2} - \alpha_{g1}) + \delta_2 \alpha_{g2} - \delta_1 \alpha_{g1} + \cos^{-1} \theta \alpha_d (\alpha_{g2} - \alpha_{g1}). \end{aligned} \quad (6)$$

### 2. 单色光束中心能量的读出值与真实值的偏差与各个可调整自由度的关系

实验上, Bragg 角转台轴角编码器零点是用标准元素的吸收边标定的. 用吸收边能量为  $E_c$ , 对应的 Bragg 角为  $\theta_c$  的元素标定轴角编码器的零点后, 由(5)式可得, 光束中心光线对第一晶体的 Bragg 角与轴角编码器所指示的角  $\theta$  有关系:

$$\theta_{b1}^0 = \theta - (\operatorname{tg} \theta - \operatorname{tg} \theta_c)((\alpha_c^2 + \alpha_{g1}^2)/2) - (\cos^{-1} \theta - \cos^{-1} \theta_c) \alpha_c \alpha_{g1}.$$

由于  $\alpha_c, \alpha_{g1}$  的影响, 此 Bragg 角在  $\theta \neq \theta_c$  时并不等于轴角编码器所指示的角, 此角与编码器指示的角之差

$$\Delta\theta_b^0 = \theta_{b1}^0 - \theta = (\operatorname{tg} \theta_c - \operatorname{tg} \theta)((\alpha_c^2 + \alpha_{g1}^2)/2) + (\cos^{-1} \theta_c - \cos^{-1} \theta) \alpha_c \alpha_{g1}.$$

设  $|\alpha_c| = |\alpha_{g1}|$ , 单色光能量中心值的读出值与真实值之偏差

$$\Delta E^0 = |-E_c \operatorname{tg} \theta \Delta\theta_b^0| \leq A \alpha_c^2,$$

其中, 令

$$A = E(|\operatorname{tg} \theta_c \operatorname{tg}^{-1} \theta - 1| + |\operatorname{ctg} \theta \cos^{-1} \theta_c - \sin^{-1} \theta|). \quad (7)$$

### 3. 单色光能量的发散与各个可调整自由度的关系

由(5)式可得, 由于入射光束发散  $\alpha_m, \beta_m$  引起的人射光束对第一晶体的 Bragg 角的发散

$$\Delta\theta_b^d = \beta_m + \operatorname{tg}\theta(\alpha_m^2/2 + |\alpha_c|\alpha_m) + \alpha_m|\alpha_{g1}|/\cos\theta,$$

故由入射光束发散及晶体的本征 Darwin 宽度  $W_D$  所引起的出射单色光能量的发散

$$\begin{aligned} \Delta E_d &= |-E\operatorname{ctg}\theta(\Delta\theta_b^d + W_D) + E(1/2 + \operatorname{ctg}^2\theta)(\Delta\theta_b^d + W_D)^2| \\ &= E(\operatorname{ctg}\theta(\beta_m + W_D) + \alpha_m^2/2 + \alpha_m|\alpha_c| + \alpha_m|\alpha_{g1}|\sin^{-1}\theta \\ &\quad + (1/2 + \operatorname{ctg}^2\theta)(\beta_m + W_D)^2). \end{aligned} \quad (8)$$

## 六、讨 论

单色光束线的主要指标是单色光强度、能量中心值的准确性及能量发散度(能量分辨率)。以下围绕这几个方面讨论各个自由度的调整精度要求及应采取的调整步骤。

1) 单色光强度与光线对第一晶体及第二晶体的 Bragg 角之差  $\Delta\theta_b$ , 满足 Rocking-curve 关系。由(6)式可知,  $\Delta\theta_b$  是由第二晶体投角的一次小量和其它因素的二次小量贡献的, 故要求晶体投角的调整精度远远好于滚角的调整精度。由于使  $\Delta\theta_b$  等于零的  $\alpha_{t2}$  值与  $\alpha_{g2} - \alpha_{g1}$  值是相关联的, 所以, 不可能分别扫描  $\alpha_{t2}$  与  $\alpha_{g2}$  使出射单色光强度达到极大。要调整单色器, 必须有反馈信息来指导我们的动作。若不仔细分析, 会认为只有当单色器两块晶体在投、滚角两个方向的不平行度都被调整到小于晶体的 Rocking-curve 宽度量级时, 才会有单色光出射, 这是错误的。从(6)式可以看出, 只需

$$\alpha_{t2} = -(\operatorname{tg}\theta/2)(\alpha_{g2} - \alpha_{g1})(\alpha_{g2} - 3\alpha_{g1}) + \cos^{-1}\theta\alpha_c(\alpha_{g2} - \alpha_{g1}) + \delta_2\alpha_{g2} - \delta_1\alpha_{g1},$$

不含  $\alpha_d$  的各二次小量项对  $\Delta\theta_b$  的贡献就可消除, 即它们对  $\Delta\theta_b$  的贡献可以由  $\alpha_{t2}$  的调整得到消除。由于入射光束具有一定的发散性, 即入射光束中不同的光线具有不同的  $\alpha_d$  值, 所以含  $\alpha_d$  的项对  $\Delta\theta_b$  的贡献不可能通过对晶体的调整得到补偿。含  $\alpha_d$  的二次小量项对光强的影响可以估计如下。对 Si  $\langle 111 \rangle$  晶体, 在 Cu 的  $K\alpha_1$  谱线能量 (8.05 keV) 处, 晶体的本征 Rocking-curve 宽度为 9.7s, 由此可以推出在  $4\text{keV} \leq E \leq 22\text{keV}$  的范围内, 其本征 Rocking-curve 半宽度  $\Delta\theta_r$  在 3.47 至 21.9s 范围内变化<sup>[1]</sup>。对 4W1B 束线,  $\alpha_m = 0.6\text{mrad}$ , 所以在  $|\alpha_{g2} - \alpha_{g1}| \leq 0.7^\circ$  时, 由于光束发散性  $\alpha_m$  引起的  $\Delta\theta_b = \cos^{-1}\theta|\alpha_m(\alpha_{g2} - \alpha_{g1})| \leq 0.008\text{mrad} \leq 2\Delta\theta_r$ , 也就是说,  $\Delta\theta_b$  处于  $\Delta\theta_r$  之间的光子数多于总光子数的 1/2, 所以由于光束发散性  $\alpha_m$  而引起的光强下降不大于一个量级。理论计算表明, 当这条束线的单色器调到最佳时, 能获得的单色同步辐射光强度的量级为  $10^8$  光子/s。所以, 当单色器两晶体在滚角方向的不平行度小于  $0.7^\circ$  时, 扫描  $\alpha_{t2}$  就可从单色器得到强度不小于  $10^7$  光子/s 的出射单色光, 从而获得进一步调整的反馈信息。由此可以建立下列双晶平行性的调整步骤:

- I) 用直角规调整晶面对 Bragg 转轴的平行性, 可使  $|\alpha_{g1}|, |\alpha_{g2}| \leq 0.7^\circ$  (见讨论 2)。
- II) 扫描  $\alpha_{t2}$  找到出射单色光。
- III) 调整  $\alpha_{g2}$ , 再扫描  $\alpha_{t2}$ 。
- IV) 不断重复过程 III, 使出射单色光强度达到极大。

当出射单色光强度达到极大时,  $\alpha_m$  对光强的影响被消除, 必然有  $\alpha_{g2} - \alpha_{g1} = 0$ , 两晶体在滚角方向达到平行。但是在此时, 两晶体在投角方向并不一定平行, 不平行度为  $(\delta_2 - \delta_1)\alpha_{g1}$ , 以补偿  $\delta_1, \delta_2$  的影响。由于  $\delta_1, \delta_2$  的可补偿性, 对其调整精度无特别要

求。

在上述调整步骤中,要求  $\alpha_{c2}$  的调整步距角小于  $(1/100)\Delta\theta_r \sim 0.03s$ ,  $\alpha_g$  的调整步距角只需小于  $(1/100)(\Delta\theta_r/\alpha_d) \sim 58s$ 。

2) 在(7)式中,在  $4\text{keV} \leq E \leq 22\text{keV}$  的能量范围内,  $A$  的极大值随  $E_c$  的变化规律如图2所示。可以看出, 应选吸收边能量  $\approx 18\text{keV}$  的元素作为标准元素来标定轴角编码器的零点。此时, 在上述能量范围内, 若要求单色光能量中心值的偏差  $|\Delta E^0| \leq 1\text{eV}$ , 则第一晶体滚角  $|\alpha_{g1}|$  和光束线的准直误差  $|\alpha_c|$  必须  $\leq 13\text{mrad}$  ( $0.7^\circ$ )。

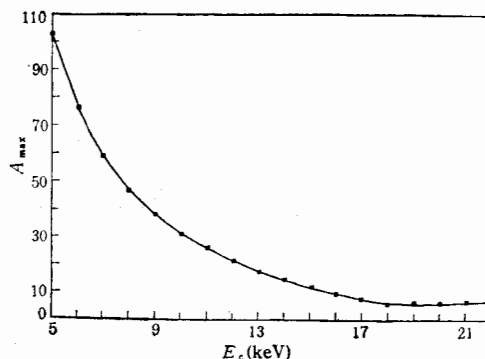


图2  $A$  的极大值随  $E_c$  的变化规律

3) 由(8)式可知,入射光束发散引起的出射单色光能量的发散由  $\beta_m, \alpha_m$  决定。 $\alpha_m$  的影响较小, 贡献为二次小量。由 Si  $\langle 111 \rangle$  晶体的本征 Rocking-curve 宽度的数值, 可以推出, 在 Cu K 吸收边能量 ( $8.979\text{keV}$ ) 处, 其本征 Darwin 宽度  $W_D = 6.1s^{[1]}$ 。根据(8)式, 由  $W_D$  引起的能量发散为  $1.2\text{eV}$ 。要使这条束线的能量分辨率  $\leq 5\text{eV}$ , 需要  $|\beta_m| \leq 0.10\text{mrad}$ 。当  $|\beta_m| = 0.05\text{mrad}$  时, 束线的能量分辨率为  $3.1\text{eV}$ 。

### 参 考 文 献

- [1] 许顺生、冯端主编,《X射线衍衬貌相学》,科学出版社,1987年版。

## Theoretical Calculation on the Adjustment of Double Crystal Monochromatic Beam Line

QIAO SHAN XIAN DINGCHANG

(Institute of High Energy Physics, Academia Sinica, Beijing 100039)

### ABSTRACT

Calculation has been made when we adjust 4W1B beam line in Beijing Synchrotron Radiation Facility. The relation among the intensity, energy dispersion, energy accuracy of the monochromatic beam and all adjustable freedoms is acquired. The reasonable procedure and the precision requirement of adjustment for each freedom are given.