

中子平面晶体谱仪的分辨宽度*

張 煥 乔

提 要

本文分析了中子平面晶体谱仪的分辨宽度,给出它的近似表示式为:

$$\Delta\theta = \sqrt{\frac{\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\beta^2 + \alpha_2^2\beta^2}{\alpha_1^2 + 4\beta^2 + \alpha_2^2}};$$

同时对几种常见情况也作了简略的讨论。为了确定计算参量 $\Delta\theta$, 又给出了晶体摇动曲线半宽度的近似表示式为: $\Delta\tau = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha_1^2 + 4\beta^2 + \alpha_2^2}$ 。以上两式中的 α_1, α_2 是第一、第二准直器的散开角; β 是晶体单色器嵌镶结构 (mosaic) 分布半宽度。最后, 依据上述结果, 计算了我们仪器的分辨宽度, 另外从该仪器测量的中子共振截面估计了它的分辨宽度, 并作了比较。

一、引 言

中子晶体谱仪是产生低能“单色”中子的仪器, 表征中子单色度的分辨率是这种仪器的一个重要性能, 它是中子能量的函数, 通常以 $\frac{\Delta E}{E}$ 表示能量为 E 的分辨率。我们从布喇格 (Bragg) 公式

$$2d \sin \theta = n\lambda \doteq n \left(\frac{0.286}{\sqrt{E(\text{ev})}} \right)$$

可以求出

$$\frac{\Delta E}{E} = 2 \cotg \theta \Delta\theta \approx 14.02d(\text{\AA}) \sqrt{E(\text{ev})} \cos \theta \Delta\theta, \quad (1)$$

式中 d 是晶体反射面族的面间距, 以埃 ($\text{\AA}$) 为单位; E 是衍射中子能量, 以电子伏 (ev) 为单位; θ 是能量为 E 的中子衍射的布喇格角; ΔE 是能量分辨宽度; $\Delta\theta$ 是角分辨宽度, 表征衍射束对布喇格角偏离的大小。决定 $\Delta\theta$ 的因素主要是 (i) 准直系统散开角; (ii) 晶体单色器嵌镶结构分布的半宽度 (在无全反射发生的范围)。对我们的 Soller 型双准直器晶体谱仪, 曾用类似文献[1]中所述方法计算了 $\Delta\theta$ 。晶体谱仪安排的示意图如图 1 所示, 其中 A 是安在反应堆孔道的第一准直器; B 是晶体单色器; C 是中子探测器前的第二准直器。

在晶体谱仪上, 从反应堆引出的中子束经过第一准直器射到晶体上被衍射后再穿过第二准直器的几率, 应该是各个过程几率的乘积。如同文献 [1] 中的考虑, 一个各向同性中子源穿

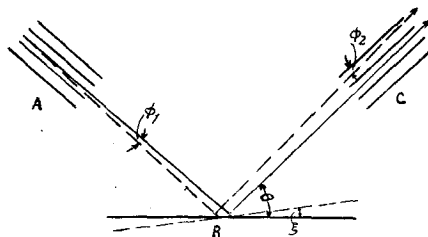


图 1 中子晶体谱仪准直器和晶体安排示意图

* 1962年11月7日收到。

过准直缝后的角分布是以中心为最强的三角形分布,但由于准直器出射端的部分“漏光”,使分布接近高斯分布。因此我们得到,中子穿过第一准直器的几率应近似地为

$$P_1(\phi_1) \sim e^{-\left(\frac{\phi_1}{\alpha_1'}\right)^2}, \text{ 且 } \alpha_1' = \frac{\alpha_1}{2\sqrt{\ln 2}},$$

其中 $\alpha_1 = s_1/l_1$, s_1 是第一准直器缝宽, l_1 是它的缝长; ϕ_1 是中子取向与准直器中心线方向的夹角。

根据单晶体嵌镶结构的考虑,设它的分布函数^[2]近似地为

$$P_2(\xi) \sim e^{-\left(\frac{\xi}{\beta'}\right)^2}, \text{ 且 } \beta' = \frac{\beta}{2\sqrt{\ln 2}},$$

式中 ξ 为某一取向嵌镶反射面和理想反射面的夹角; β 为嵌镶结构分布角的半宽度。

同样,中子穿过第二准直器的几率也近似地为

$$P_3(\phi_2) \sim e^{-\left(\frac{\phi_2}{\alpha_2'}\right)^2}, \text{ 且 } \alpha_2' = \frac{\alpha_2}{2\sqrt{\ln 2}},$$

其中 $\alpha_2 = s_2/l_2$, s_2 是第二准直器缝宽, l_2 是它的缝长; ϕ_2 是中子取向和准直器中心线方向间的夹角。因此,假定在仪器能量分辨宽度 ΔE 内,入射中子束强度与能量无关,则衍射中子的几率应为:

$$P_1(\phi_1)P_2(\xi)P_3(\phi_2) = k \exp - \left[\left(\frac{\phi_1}{\alpha_1'} \right)^2 + \left(\frac{\xi}{\beta'} \right)^2 + \left(\frac{\phi_2}{\alpha_2'} \right)^2 \right].$$

二、中子平面晶体谱仪的分辨宽度

由衍射中子几率可知,布喇格角宽度为 $\theta' - \theta$ 的分辨函数应该为

$$P(\theta' - \theta) = k \int_{\xi_0}^{\xi_0'} \exp - \left[\left(\frac{\phi_1}{\alpha_1'} \right)^2 + \left(\frac{\xi}{\beta'} \right)^2 + \left(\frac{\phi_2}{\alpha_2'} \right)^2 \right] d\xi. \quad (2)$$

设谱仪的准直系统、晶体都处于布喇格衍射条件要求下, θ 为平行于准直器中心线方向的中子被 $\xi = 0$ 反射面衍射的布喇格角; θ' 是散开角为 ϕ_1 的入射中子被 ξ 取向反射面衍射的布喇格角; ξ_0, ξ_0' 是极限衍射束所相应的 ξ 值。从图 1 可见:

$$\phi_1 = \theta' - \theta - \xi, \quad \phi_2 = \theta' - \theta + \xi.$$

如果令 $\delta \equiv \theta' - \theta$, 则得

$$\phi_1 = \delta - \xi, \quad \phi_2 = \delta + \xi,$$

将 ϕ_1, ϕ_2 之关系代入(2)中,得分辨函数为

$$P(\delta) = k \int_{\xi_0}^{\xi_0'} \exp - \left[\frac{(\delta - \xi)^2}{\alpha_1'^2} + \frac{\xi^2}{\beta'^2} + \frac{(\delta + \xi)^2}{\alpha_2'^2} \right] d\xi.$$

然后将被积函数的幂指数按 ξ 配方,得

$$P(\delta) = k \exp - \left[\alpha_1'^2 + \alpha_2'^2 - \frac{\beta'^2(\alpha_1'^2 - \alpha_2'^2)^2}{(\alpha_1'^2\alpha_2'^2 + \alpha_1'^2\beta'^2 + \alpha_2'^2\beta'^2)} \right] \frac{\delta^2}{\alpha_1'^2 \cdot \alpha_2'^2} \int_{\xi_0}^{\xi_0'} J(\delta\xi) d\xi,$$

其中

$$J(\delta, \xi) \equiv \exp - \left[\frac{\sqrt{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2}}{\alpha_1' \beta' \alpha_2'} \xi + \frac{\beta'(\alpha_1'^2 - \alpha_2'^2)\delta}{\alpha_1' \alpha_2' \sqrt{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2}} \right]^2.$$

只要多狭缝准直器极限角 ξ_0, ξ'_0 相当大¹⁾, 则上式积分限可以近似用 $(-\infty, +\infty)$ 来代替. 这样一来, 积分上式后得到

$$P(\delta) = \sqrt{\pi} k \frac{\alpha_1' \beta' \alpha_2'}{\sqrt{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2}} \exp - \left[\alpha_1'^2 + \alpha_2'^2 - \frac{\beta'^2(\alpha_1'^2 - \alpha_2'^2)^2}{(\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2)} \right] \frac{\delta^2}{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2}. \quad (3)$$

由(3)式 $P(\delta)$ 最大值之半高宽度得出

$$\Delta\theta = \sqrt{\frac{\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_1^2 \beta^2 + \alpha_2^2 \beta^2}{\alpha_1^2 + 4\beta^2 + \alpha_2^2}}. \quad (4)$$

因此, 在双准直器下, 分辨宽度为它们的散开角 α_1, α_2 和晶体嵌镶结构分布半宽度 β 所确定. 而我们的仪器之 $\Delta\theta$ 正为(4)式给出. 下面再分别讨论几种情况:

(1) **在相同散开角的双准直器下仪器的分辨宽度** 属于这种结构的仪器, 新近出现较多. 这时 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, 以此代入(4)式, 得出

$$\Delta\theta_\alpha = \alpha / \sqrt{2}, \quad (4a)$$

由此可见, 这时分辨宽度与 β 无关^[1].

此外还应看到, 采用一对全同准直器和晶体对称配置, 可以有较大的强度. 因为这时, (i) 仪器在运转中, 两准直器缝始终对应; (ii) 嵌镶结构晶体衍射, 有类似粉末晶体反射那种部分“聚焦”的性能, 且“聚焦”中心和入射束散开中心大致对称, 例如见文献[3].

(2) **在完整晶体双准直器下仪器的分辨宽度** 利用完整晶体作单色器, 它的 β 很小 (如常见 β 很小的天然晶体 CaCO_3 , 就是一例). 这时 $\beta \ll \alpha_1, \alpha_2$, 将它代入(4)式, 给出相应的分辨宽度为

$$\Delta\theta_\beta \doteq \alpha_1 \alpha_2 / \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}. \quad (4b)$$

(3) **在 $\alpha_2 > \alpha_1, \beta$ 时仪器的分辨宽度** 这类仪器如文献[3, 4]中所描述, 它们的第一准直器对 $\Delta\theta$ 起主要作用, 第二准直器的贡献较少, 因后者是用于减少本底. 这时 $\Delta\theta$ 仍为(4)式表示, 但要恰当选取 α_2 值. 即令在无第二准直器下, 仍存在一个 α_2 值, 其大小为探测器限孔宽度、散开束照射晶体的宽度以及探测器和晶体二者相对位置确定. 如果存在第二准直器, 只有它的散开角小于这 α_2 时才起作用.

三、晶体摇动曲线半宽度的计算

在我们考虑双准直器的情形下, 当摇动晶体 γ 角时, 从相应的衍射图象中可以看出,

$$\theta' = \theta + \phi_1 + \xi + \gamma \text{ 和 } \theta' = \theta + \phi_2 - \xi - \gamma,$$

以 δ 代入, 得出

$$\phi_1 = \delta - \xi - \gamma, \quad \phi_2 = \delta + \xi + \gamma,$$

把 ϕ_1, ϕ_2 的表示式代入(2)中, 给出摇动晶体 γ 角后的分辨函数为

1) 在大多数 Soller 型准直器下是如此.

$$\begin{aligned}
 P(\delta, \gamma) &= k \int_{\xi_0}^{\xi'_0} \exp - \left[\left(\frac{\delta - \xi - \gamma}{\alpha'_1} \right)^2 + \frac{\xi^2}{\beta'^2} + \left(\frac{\delta + \xi + \gamma}{\alpha'_2} \right)^2 \right] d\xi \approx \\
 &\approx \sqrt{\pi} k \frac{\alpha'_1 \beta' \alpha'_2}{\sqrt{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2}} \exp - \\
 &\quad - \left[\frac{(\alpha_1'^2 + 4\beta'^2 + \alpha_2'^2) \delta^2 + 2\gamma(\alpha_1'^2 - \alpha_2'^2) \delta + (\alpha_1'^2 + \alpha_2'^2) \gamma^2}{\alpha_1'^2 \alpha_2'^2 + \alpha_1'^2 \beta'^2 + \alpha_2'^2 \beta'^2} \right].
 \end{aligned}$$

上式中的积分, 只要极限角 ξ_0, ξ'_0 足够大, 则积分限可近似地以 $(-\infty, +\infty)$ 来代替. 至于所求的摇动曲线是 $P(\delta, \gamma)$ 再对 δ 积分:

$$P(\gamma) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} P(\gamma, \delta) d\delta = \pi k \frac{\alpha'_1 \beta' \alpha'_2}{\sqrt{\alpha_1'^2 + 4\beta'^2 + \alpha_2'^2}} \exp \frac{-4\gamma^2}{(\alpha_1'^2 + 4\beta'^2 + \alpha_2'^2)}. \quad (5)$$

由 $P(\gamma)$ 最大值之半高得出摇动曲线半宽度为

$$\Delta\gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_1'^2 + 4\beta'^2 + \alpha_2'^2}, \quad (6)$$

可见 $\Delta\gamma$ 也为 α_1, α_2 和 β 确定, 且一般说来, $\Delta\gamma > \Delta\theta$. 下面也简单讨论几种情况.

(1) 在相同散开角的双准直器下, 晶体摇动曲线的半宽度: 相应这种情况是 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, 以此代入(6)式, 得出摇动曲线半宽度为

$$\Delta\gamma_\alpha = \sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + \beta^2}, \quad (6a)$$

表明 $\Delta\gamma_\alpha$ 与 β 有关, 这和文献[1]中的结果相同. 与 $\Delta\theta_\alpha$ 相比较, 可知 $\Delta\gamma_\alpha \geq \Delta\theta_\alpha$.

(2) 在完整晶体下摇动曲线的半宽度: 这时由于 $\beta \ll \alpha_1, \alpha_2$, 把它代入(6)式, 得出

$$\Delta\gamma_\beta = \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_1'^2 + \alpha_2'^2}. \quad (6b)$$

至于对 $\alpha_2 \gg \alpha_1, \beta$ 时, 如果有足够大的极限散开角 ξ_0, ξ'_0 , $\Delta\gamma$ 仍由(6)式表之. 不过应针对每种具体仪器结构来分析该近似条件是否满足, 为此, 摇动曲线半宽度应结合相应的具体情况来加以讨论.

四、结果的实验检定

利用上述结果, 计算了我们的仪器的分辨宽度. 虽然不能直接测出 $\Delta\theta$ 与计算进行比较, 但可以通过一些包含有分辨率因素影响的实验结果, 来估计出仪器相应的分辨宽度, 从而进行检定. 例如, 用测量的共振中子截面, 依据共振峰的分析, 估计出仪器的 $\Delta\theta$, 以此判明(4)式的适用性.

对我们的仪器来说, 第一准直器长 1.8 米, 缝宽 1.5 毫米; 第二准直器长 1 米, 缝宽也是 1.5 毫米; 它们相应的 $\alpha_1 \approx 2.86'$, $\alpha_2 \approx 5.15'$. 曾分别采用 $\text{SiO}_2(3140)$, $\text{CaCO}_3(100)$ 和 $\text{NaCl}(200)$ 晶体, 在一系列 θ 角位置测量了晶体的摇动曲线, 所得到的半宽度 $\Delta\gamma$ 皆列在表 1 中.

由表 1 可见, 当中子能量较小 (θ 较大) 时, 准直器铜片对中子产生全反射, 这时 $\Delta\theta$ 、 $\Delta\gamma$ 与全反射临界角 θ_c 有关(文献[5]中已作了详细讨论). 对无全反射时, $\Delta\gamma$ 应不随 θ 变化, 实验观测值也基本上是如此. 由表 1 中取无全反射范围 $\Delta\gamma$ 的平均值, 其结果为:

表 1 用 $\text{SiO}_2(31\bar{4}0)$, $\text{CaCO}_3(100)$ 和 $\text{NaCl}(200)$ 晶体在各种 θ 下测得的摇动曲线半宽度 $\Delta\gamma$.

$\text{SiO}_2(31\bar{4}0)$		$\text{CaCO}_3(100)$		$\text{NaCl}(200)$	
θ	$\Delta\gamma$	θ	$\Delta\gamma$	θ	$\Delta\gamma$
$1^\circ 44' 30''$	$3' 21''$	2°	$3' 52''$	$1^\circ 41'$	$9' 12''$
$5^\circ 27' 30''$	$3' 48''$	3°	$3' 54''$	$2^\circ 30' 30''$	$9' 20''$
6°	$3' 12''$	$3^\circ 44' 30''$	$3' 54''$	$7^\circ 8' 30''$	$9' 36''$
11°	$3' 30''$	$7^\circ 46'$	$4'$	$15^\circ 19'$	$12'$
16°	$3' 48''$	$8^\circ 8' 15''$	$5' 10''$	$28^\circ 7' 30''$	$13'$
$29^\circ 41'$	$5' 42''$	$13^\circ 46' 15''$	$6' 14''$		
34°	$6' 24''$				

$\text{SiO}_2(31\bar{4}0)\Delta\bar{\gamma} \approx 3.5'$; $\text{CaCO}_3(100)\Delta\bar{\gamma} \approx 3'55''$; $\text{NaCl}(200)\Delta\bar{\gamma} \approx 9'23''$; 利用这些 $\Delta\bar{\gamma}$ 和 α_1 , α_2 的设计值代入(6)式, 分别求出各种晶体的 β , 再将相应的 β , α_1 和 α_2 代入(4)式, 算出各种晶体对应的 $\Delta\theta$, 现将所有结果都列入表 2 中 [将 $\Delta\theta$ 代入(1)式, 可以算出仪器的分辨率曲线].

表 2 $\text{SiO}_2(31\bar{4}0)$, $\text{CaCO}_3(100)$ 和 $\text{NaCl}(200)$ 晶体的 β 和相应的 $\Delta\theta$ (无全反射时)

晶 体	$\text{SiO}_2(31\bar{4}0)$	$\text{CaCO}_3(100)$	$\text{NaCl}(200)$
$\Delta\bar{\gamma}$	$3.5'$	$3'55''$	$9'23''$
β	$1.9'$	$2.6'$	$8.9'$
$\Delta\theta$	$2.6'$	$2.7'$	$2.9'$

一个校核以上计算的办法是: 利用已知 β (例如用 X 射线衍射法测出) 的晶体, 在中子晶体谱仪上测出摇动曲线, 利用(6)式算出 β 与其比较. 由于我们的仪器上使用晶体的 β 值, 未曾用其他方法测定, 暂无法作此比较. 下面我们将采用分析中子截面共振峰的方法, 去估计出仪器的 $\Delta\theta$, 以进行检验.

为了判定 $\Delta\theta$ 表示式(4)的适用性, 我们分析了较高能量 (几个电子伏) 的共振峰 (这时无全反射), 照说最满意的情况是共振宽度 Γ 远小于 ΔE , 则可通过观察共振峰形状和 Γ 来定出 $\Delta\theta$. 如果分析共振峰的 Γ 比 ΔE 大 (或相近), 共振峰形状随 ΔE 变化较弱, 但这时各分辨率相近仪器, 观察的共振峰形状应相近.

在我们的仪器上曾用 $\text{SiO}_2(31\bar{4}0)$ 测量了 Ag, In, Rh, Au 等中子全截面, 例如对银 5.2 电子伏的共振峰 (图 2), 其 Γ 已和仪器的 ΔE 相近, 因而分析 $\Delta\theta$ 的灵敏性受到了一定的限制. 在我们对银 5.2 电子伏共振峰的形状法分析中, 利用了文献 [6, 7] 给出的共振参量. 其中银的有效温度 $T_{\text{有效}} = 1.08T = 318.6^\circ\text{K}$, T 是银样品温度, 这时相应的都卜勒宽度 Δ 为 0.073 电子伏. 最后分析结果表明, 如果采用 $\Delta\theta$ 为 $2.5'$, 计算与测量数据较好符合 (见图 2); 但由于银

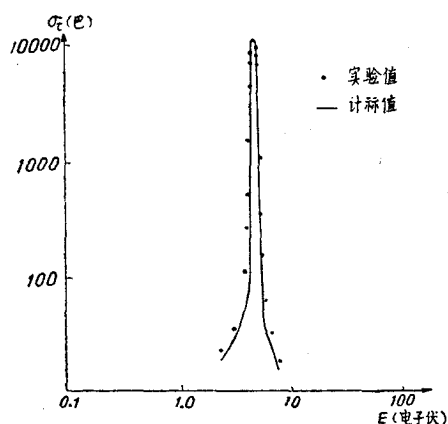


图 2 Ag5.2 电子伏的共振截面

的 σ_i 测量精度不足(可以测得更好),例如对 $E = 5.2$ 电子伏最好的 σ_i 值, $\frac{\Delta\sigma_i}{\sigma_i} \approx 6.2\%$ ($\sigma_i = 10700$ 巴),再加上银共振峰对 $\Delta\theta$ 不够灵敏,使得 $\Delta\theta$ 的不确定范围估计约为 $\pm 0.3'$. 由此可见,分析共振峰估计的 $\Delta\theta$ 值和从摇动曲线定出 β 算得的 $\Delta\theta$ (见表 2) 是相近的,表明 $\Delta\theta$ 的表示式 (4) 的近似适用性. 另外从分辨宽度 $\Delta\theta$ 为 $1.6'$ 的布鲁克海文晶体谱仪^[7] 测出银 5.2 电子伏共振峰 Γ 为 ~ 0.22 电子伏,而我们的仪器测出的为 0.23 电子伏,确是彼此相近的.

最后,对戴传曾先生给我热情的指导表示衷心的感谢.

参 考 文 献

- [1] Sailor, V. G., et. al., *R. S. Instr.*, **27** (1956), 26.
- [2] Zacharizen, W. H., *X-ray Diffraction in Crystal*, New York, 1945.
- [3] Hurst, D. G., et. al., *R. S. Instr.*, **21** (1950), 705.
- [4] Borst, L. B., et. al., *R. S. Instr.*, **23** (1953), 141.
- [5] Bally, D., et. al., *R. S. Instr.*, **31** (1960), 640.
- [6] Юз, Д., *Атлас нейтронных сечений*, 1959, Издво. иностр. лит.
- [7] Wood, R. E., *Phys. Rev.*, **104** (1956), 1425.

РАЗРЕШАЮЩАЯ ШИРИНА КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НЕЙТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА С ПЛОСКИМ КРИСТАЛЛОМ

Чжан Хуан-чао

Резюме

В статье проанализирована разрешающая ширина кристаллического нейтронного спектрометра с плоским кристаллом. Получено приближенное выражение $\Delta\theta = \sqrt{\frac{\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\beta^2 + \alpha_2^2\beta^2}{\alpha_1^2 + 4\beta^2 + \alpha_2^2}}$. Произведено обсуждение для некоторых часто встречающихся случаев. Для расчета параметра $\Delta\theta$ дана формула полуширины кривой отражения $\Delta\gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_1^2 + 4\beta^2 + \alpha_2^2}$, где α_1 и α_2 — углы расходимости колиматора I и II, β — полуширина мозаичного распределения кристалл-монокроматора. На конец, вычислена разрешающая ширина для нашего спектрометра по выше полученным данным и оценена таковая на основе измеренных сечений нейтронного резонанса. Сопоставляются полученные результаты.