

同步辐射 X 射线成像光束线劳厄双晶单色器设计*

胡雯 谢红兰 杜国浩 肖体乔¹⁾

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

摘要 上海光源 X 射线成像光束线采用多极扭摆器(wiggler)作为辐射光源,提出一种劳厄双弯晶单色器的设计方案.计算结果显示,可获得固定出口的平行单色光束,能量调谐范围覆盖 19—120keV,在 33keV 时,输出光子通量及通量密度分别为 1.9×10^{13} phs/s 和 3.8×10^{10} phs/s/mm².分析了劳厄晶体的聚焦及单色化性能,计算了输出光子通量及单色器的热负载情况.与传统的双平晶方案相比,本设计在获得高通量和解决热负载等方面有明显的优越性,并能有效控制热形变.

关键词 X 射线成像 同步辐射 劳厄晶体 单色器设计

1 引言

随着第三代同步辐射装置的广泛使用, X 射线光源的特性得到了极大的改善,可以提供均匀、单色、高相干性、高通量的 X 射线,为新的 X 射线成像方法的诞生、发展及其应用创造了条件.目前,国际上新建的第三代同步辐射装置如加拿大光源(CLS)、瑞士光源(SLS)、澳大利亚光源(AS)和西班牙光源(ALBA)等都建了一条或多条生物医学成像光束线.上海光源(SSRF)也正在建造一条 X 射线成像及生物医学应用光束线,采用多极 wiggler 作为辐射光源,以获得大光斑尺寸、高通量密度和能量调谐范围宽的单色 X 射线,但随之产生的高热负载就成为光束线设计中需要解决的关键问题.成像光束线通常不需要在单色器前加准直镜,双晶单色器系统即可保证束线的单色光($\Delta E/E \sim 10^{-3}$)输出.但这样会使主要的热负载落在单色器上,因此如何降低单色器上的热负载至关重要.为此,本文提出一种劳厄双弯晶的单色器设计方案.

与传统的双平晶方案²⁾相比,采用不对称切割的劳厄型弯晶主要有两大优点:1)透射模式下由于衍射面的弯曲,增加了反射率宽度,提高了光通量(特别在高能范围内^[1]);2)使用透射式劳厄弯晶有利于降低晶

体上的热负载,因为采用薄晶且入射光为高能 X 射线,大部分射线经过反射直接透过晶体而未被吸收,这些特点对成像光束线很有意义.目前,为高能 X 射线应用所设计的各种双劳厄晶体单色器,已在多个同步辐射装置上都得到了成功应用^[2-5],并且可以和其他各种同轴光学元件组合使用^[6,7],进一步提高束流性能.

本文讨论了劳厄弯晶的聚焦特性,单色器的光学设计;分析计算了组合滤片及单色器上的热负载及输出光通量情况;最后讨论了单色器的冷却方案.结果表明:本设计在解决高热负载的同时,可获得高通量、定出口的平行单色光束,能量调谐范围覆盖 19—120keV,并能有效控制热形变.

2 光学系统设计

成像光束线的关键部件是单色器,因此晶体单色器的设计是整条光束线光学设计的重点.选取不对称切割的劳厄 Si 晶体作为单色器,以[111]晶面作为衍射平面,采用柱状弯曲的双晶体单色器结构.

2.1 劳厄弯晶聚焦原理

弯晶聚焦原理与普通光学元件类似,其反射方向由布拉格平面(反射面)决定.柱状弯晶对 X 射线的聚焦有几种不同模式,对应的出射光可以是会聚的或者

2006-09-27 收稿

* 国家自然科学基金(10505028)资助

1) E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn

2) 肖体乔,谢红兰,杜国浩.上海光源工程光束线设计报告——X 射线成像及生物医学应用光束线站,2006年6月,内部报告

发散的, 单色光或者多色光, 具体由光源和像点的位置所决定, 如图1所示, 其中光束的传播方向可逆. 当光源位于聚焦圆(罗兰圆)上时, 反射束为单色光并保持初始光束的发散度, 如图1(a); 当光源位于罗兰圆内部某一弦的中点上时, 反射束为多色的平行光束, 如图1(b)中所示; 当光源位于罗兰圆外部时, 得到发散光, 圆内部产生一个多色的虚焦点, 如图1(c)中所示.

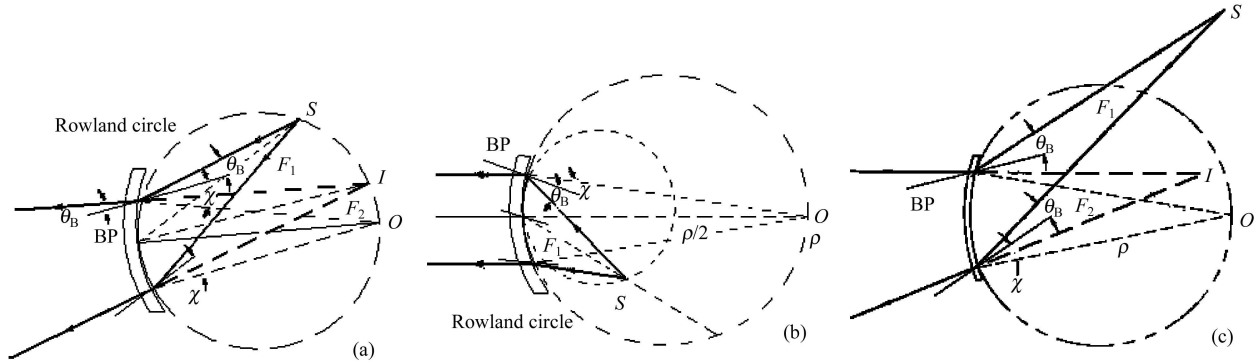


图1 柱状劳厄弯晶的X射线衍射

(a) 光源 S 位于聚焦圆上; (b) 光源 S 位于聚焦圆内弦的中点上; (c) 光源 S 位于聚焦圆外.

柱状弯曲晶体的X射线光学基本公式为

$$\frac{\cos(\chi \pm \theta_B)}{F_1} + \frac{\cos(\chi \mp \theta_B)}{F_2} = \frac{2}{\rho}, \quad (1)$$

入射X射线位于布拉格平面与实际晶面法向之间时, 公式(1)中符号依次取“+”“-”; 而当入射X射线位于布拉格平面与实际晶面法向之外时, 公式(1)中符号依次取“-”“+”. 当X射线从弯晶的凹面(凸面)入射时, 晶体的曲率半径 ρ 取正值(负值).

2.2 单色器光路设计

针对不同的应用需要, 人们提出了许多不同的双劳厄弯晶结构^[8]. 本设计采用了不对称切割的晶体Si, 以[111]晶面作为衍射平面, 两晶体采用无色散排列方式(如图2所示), 光源 S 位于第一晶体罗兰圆上, 第二晶体以第一晶体的虚像点 S' 作为光源. 第一晶体的曲率半径 ρ_1 取为30m, 考虑将主能区范围定在20到35keV, 则第二晶体的曲率半径 ρ_2 取为66m. 单色器放置在距光源23m处, 两晶体宽度为100mm, 中心区厚度1mm, 采用 35.26° 的不对称切割角 χ , 入射到晶体上的光斑尺寸受到前端区光阑接收度的限制.

如图2所示, 光源 S 位于晶体的凹面一侧, 公式(1)中的曲率半径 ρ 及 F_1 取正值, 当光源 S 位于第一晶体罗兰圆上, 可获得单色光. 光源点 S 与晶体间距 F_1 须满足关系(如图1(a)所示): $F_1 = \rho_1 \cos(\chi + \theta_B)$, 其中 ρ_1 为第一晶体的曲率半径, χ 为其不对称切割角, F_1 为光源到第一晶体的距离. 以第一晶体的虚像点 S' 作为

图1中 θ_B 为布拉格角; χ 为不对称切割角, 是布拉格平面与实际晶面之间的夹角; BP 为布拉格平面; F_1 为光源到晶体的距离; F_2 为晶体与焦点间距离; ρ 为曲率半径. 光束从光源点 S 入射到晶体上, 当其于劳厄晶体罗兰圆相对位置发生改变时, 可得到不同的聚焦情况. 依据劳厄弯晶的聚焦特性, 就可根据实验要求设计结构不同的单色器以满足需要.

第二晶体的光源时, 调节第二晶体的曲率半径 ρ_2 , 当 S' 同时位于其罗兰圆某一弦的中点时, 适当调节两晶体间距, 即可得到固定出口、能量可调的平行单色光束, 为获得均匀稳定的光斑提供了保证. 在保证高通量的同时实现了光斑的均匀性, 是本设计的主要优点之一, 特别对要求样品处光斑强度分布均匀的成像光束线, 非常有益.

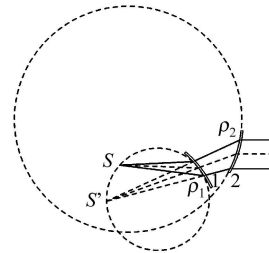


图2 双劳厄弯晶单色器光路示意图

对于本设计方案, 公式(1)中符号依次取“+”“-”, 即: $\frac{\cos(\chi + \theta_B)}{F_1} + \frac{\cos(\chi - \theta_B)}{F_2} = \frac{2}{\rho}$, 为单一晶体的聚焦方程. 其中 ρ 为晶体的曲率半径, χ 是晶体的不对称切割角, θ_B 为布拉格角, F_1 为光源到晶体的距离, F_2 为晶体与焦点间距离. 对第二晶体, S' 位于第二晶体罗兰圆某弦的中点, 即 S' 在一个以 $\rho_2/4$ 为半径的圆上, S' 与第二晶体距离 F_1 为 $\frac{\rho_2}{2} \cos(\chi + \theta_B)$, F_2 为无穷大. 两晶体曲率半径不等, 由光路的几何关系推出 ρ_1, ρ_2

满足如下关系:

$$\frac{\rho_2}{2} = [\rho_1 \cos(\chi - \theta_B) + L] / \cos(\chi + \theta_B), \quad (2)$$

其中 L 为两晶体之间的距离. 设两晶体间的固定高差为 40mm, 则 $L = \frac{0.04}{\sin 2\theta_B}$.

单色器的能量分辨率由公式(3)^[9]给出:

$$\Delta E/E = \varepsilon[1 + F_1/\rho_1 \cos(\chi + \theta_B)] \cot \theta_B, \quad (3)$$

其中 ε 为入射光束的垂直发散角. 利用 SHADOW¹⁾ 追迹可以得到入射光束的发散角, 进行能量分辨率的计算.

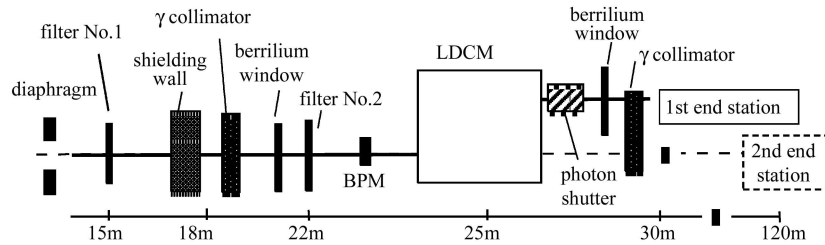


图3 光束线总体布局示意图

此处LDCM(Laue Double Crystal Monochromator)指双劳厄弯晶单色器, 图中只给出了双晶单色器的位置, 内部结构随不同的单色器模型的选择调整.

3 热负载、光通量分析及冷却方案设计

3.1 热负载及输出光通量分析

上海同步辐射装置(SSRF)正在建的X射线成像及生物学应用光束线, 以多级Wiggler作为插入件, 如何解决热负载问题成为设计中的关键. 为了更好保持三代光源良好的相干特性, 一个重要的设计原则是减少反射式光学元件的数量. 成像光束线通常不需要输出光束具有很好的单色性, 因此不需要在单色器前加准直镜, 双晶单色器系统即可保证束线的单色光($\Delta E/E \sim 10^{-3}$)输出. 但这样会使主要的热负载落在单色器上, 因此如何降低其热负载至关重要.

表1给出了多极Wiggler的参数. 为了使输出光子能量维持在一个较高的水平, 通过调节插入件 K 值来控制其辐射功率, 并维持输出光子能量的连续性.

利用软件XOP²⁾, 采用以下参数进行计算: 储存环电子能量3.5GeV、流强300mA、Wiggler周期长度14cm、磁极数16. 图4给出了对应不同 K 值,

2.3 光束线布局

光束线的总体布局见图3, 考虑在前端区内加碳膜, 以减轻下游滤波器组件热负载. 出防护墙后, 加 γ 准直器阻挡由前端区过来的初级韧致辐射, γ 准直器后加水冷铍窗隔离真空同时起滤波作用. 铍窗后采用滤波器组件滤去不必要的低能X射线, 以降低单色器的热负载. 通过改变滤波片厚度及材料类型的组合来选择不同的光子能量范围, 常用的吸收材料有C, Al, Be等, 滤波片厚度几个毫米或几百微米不等. 滤波器组件后是一个BPM, 主要用于调束. 单色器采用双劳厄弯晶单色仪, 后面使用光子光闸, 用于挡光及精确控制曝光时间. X射线经单色化后入射到样品.

在1mrad的固定水平发散角内, 光源处光通量随能量的变化情况. $E > 9\text{keV}$ 后输出通量随 K 值单调增加, 当 $K=25.4$ 时, $E=120\text{keV}$ 的光子通量大于 $10^{12}\text{phs/s}/0.1\% \text{BW}$.

表1 多极Wiggler参数

参数	数值
磁感应强度 B_{\max}	1.944 Tesla
周期长度	14cm
最大临界能量@3.5GeV	15.84keV
磁极数	16
K_{\max}	25.4
最大的总功率	9.84kW
最大的峰值功率密度	$1.025\text{MW}/\text{mm}^2$ @source point

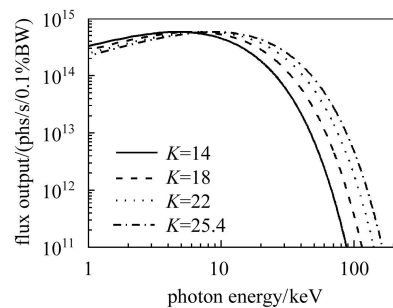


图4 不同 K 值下的单位水平发散角内光源输出通量随光子能量变化

1) M.S.del Ri, Shadow VUI 1.0 Beta 4.1 (ESRF, 2004), <http://www.esrf.fr/computing/scientific/xop/>

2) M. S. del Rio and R. J. Dejus, XOP2.1 Beta3 (2003), <http://www.esrf.eu/computing/scientific/xop2.1/>

不同 K 值下, 调节滤波片的种类和厚度, 可以充分吸收不必要的低能端光子, 从而有效地降低单色器热负载. 设计中选取 C, Al 作为滤波片来吸收低能端光子, 分析了不同 K 值下光学元件的热负载, 以便选择滤波片的种类和厚度, 具体的厚度选择及热负载分

析如表 2 所示, 并在图 5(a), (b) 中分别给出了透过单色器前、后的光子通量输出情况. 计算中 Be 窗的厚度为 0.5mm, 前端区光阑的接收度为 $2.0\text{mrad} \times 0.3\text{mrad}$. 在设计和选择组合滤波片时主要考虑: 1) 确保对应的通量输出高; 2) 单色器晶体上的热负载较小.

表 2 不同 K 值下的滤波片和晶体上的功率分布

K 值	总功率/W	前端光阑 吸收功率/W	(石墨吸收 功率/厚度)/(W/mm)	Be 窗吸收 功率/W	(Al 吸收 功率/厚度)/(W/mm)	输出功率/W	(第一晶体吸收 功率/厚度)/(W/mm)
14	2977	1206	951/2	17	280/0.5	283	128/1
18	4927	2924	1108/2.5	22	477/1	396	139/1
22	7263	4897	1175/2.5	29	732/1.6	529	138/1
25.4	9807	6956	1215/2.5	35	962/2.2	639	134/1

对应的通量输出如图 5 所示, 图 5(b) 中给出了样品处的光子通量随能量变化曲线. 样品处 X 射线的光通量可由光源参数、滤波片的吸收及单色器晶体的传输效率等计算得到. 结果显示: 第一块晶体的热负载符合要求, 不会对单色器的输出特性造成明显影响, 根据国际上的经验可以采取水冷方式进行冷却. 通过计算得出, 针对不同的能量范围, 选用不同的 K 值和滤波片厚度, 可以在热负载和光子通量上取得一个平衡. 根据图 5 设定各 K 值所对应的优化光子能量范围及其通量输出, 单色器的能量调谐范围覆盖 19—120keV, 选用不同的 K 值, 单色器光子能量范围可覆盖 19—120keV, 并确保输出光通量达到 6×10^{11} phs/s 以上. 本设计中的输出光束为平行单色光, 光斑尺寸为 $50\text{mm} \times 10\text{mm}$, 在 33keV 时输出光子通量为 1.9×10^{13} phs/s, 因此估算出输出光子通量密度为 3.8×10^{10} phs/s/mm², 可以满足实验要求.

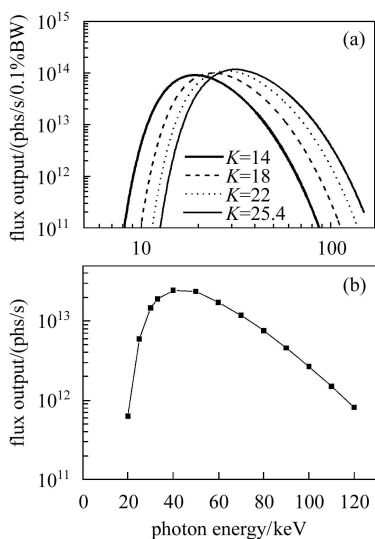


图 5 光子通量输出
(a) 单色器前, 不同 K 值所对应的光子通量输出;
(b) 单色器后光子通量输出.

3.2 冷却方案设计

如何降低晶体的热负载, 对于成像光束线单色器的设计至关重要, 只有采用合适的冷却方式, 才能保证晶体的热变形足够小, 而不致影响其光学特性. 现有技术表明, 当功率密度小于 $1\text{W}/\text{mm}^2$ 时, 可以采用水冷, 否则只能采用液氮冷却, 但总的吸收功率均不能太高. 上述设计方案中, 采取调节插入件 K 值、组合滤波片的类型及厚度等方法控制单色器热负载, 结果表明第一晶体总的吸收功率小于 150W. 当单色器距光源 30m 时, 计算得第一晶体的最大功率密度为 $0.4717\text{W}/\text{mm}^2$, 远小于 $1\text{W}/\text{mm}^2$. 因此根据国际上已有经验, 可以采取水冷方式对第一晶体进行冷却.

参照国际上成功的设计经验, 结合设计的实际需要, 图 6 中给出了单色器第一晶体及其冷却系统示意图. 晶体的上下两部分较中心区域要厚的多, 这样可以提高硬度并能更好的与冷却管接触; 20mm 高的中心区厚度仅为 1mm. 设计采用使晶体的顶部和底部直接与 InGa 共晶接触的方法进行冷却. 晶体底部固定在一个水冷的铜块上, 晶体与铜块之间放一层很薄的 InGa 共晶; 晶体的顶部开一个凹槽同样注入 InGa 共晶,

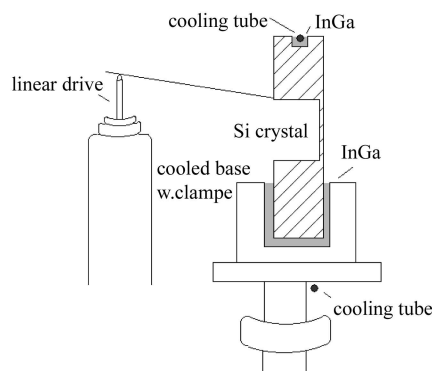


图 6 第一晶体冷却、弯曲机构示意图
晶体的顶部凹槽中装有 InGa 溶液, 水冷却管顶端部分浸泡于溶液中.

并不接触晶体的情况下,将用于冷却的水管浸入其中.设计中的一个重要原则是:冷却与弯曲是两个独立的系统,设计由板簧对晶体进行压弯,采用线性驱动装置对板簧进行控制,其自由端与晶体的上部接触,当板簧自由端被推动时,弯曲瞬间晶体中心很薄的部分弯成柱状.因此,系统中唯一作用在晶体上的力是由板簧和固定底部的夹子引起的.这种构造最初是由Brookhaven国家实验室提出的^[10],第二晶体与第一块晶体相同,但是不需要冷却.

4 结论

本文对上海同步辐射装置的成像光束线的单色器设计进行了一种新的尝试,与传统的双平晶结构不

同,设计中采用劳厄型弯晶作为单色器,在较好的解决热负载问题的同时,为增加样品处X射线的光通量,得到强度分布均匀的光斑提供了一种新的解决方法.在19—120keV能量范围内,可得到稳定的定出口单色光.

本设计的能量分辨率较低,大约只在 10^{-3} 量级,但因成像光束线本身对单色性要求不高,此量级的分辨率可满足实验需要.计算中采用前端区光阑的接收度为 $2.0\text{mrad}\times 0.3\text{mrad}$,此接收度可适当扩大,必要时甚至可去除光阑,具体可依据实际单色器尺寸进行调节,以获得更高的光通量.但要获得理想的单色光,还需要进一步考虑如何控制压弯机构的精度,抑制高次谐波,如何实现冷却机制的优化等问题.

参考文献(References)

- 1 ZHONG Z et al. J. Appl. Cryst, 2001, **34**: 504—509
- 2 REN B, Dilmanian F A, Chapman L D et al. Nucl. Instrum. Methods, 1999, **A428**: 528—550
- 3 Suortti P, Fiedler S, Bravin A et al. J. Synchrotron Rad., 2000, **7**: 340—347
- 4 ZHONG Z, Chapman D et al. Phys. Med. Biol., 1997, **42**: 1751—1762
- 5 ZHONG Z, Chapman D et al. J. Synchrotron Rad., 1999, **6**: 212—214
- 6 Suortti P, Thomlinson W. Nucl. Instrum. Methods, 1988, **A269**: 639—648
- 7 Suortti P, Lienert U, Schulze C. AIP Conf. Proc., 1997, **389**: 175—192
- 8 Erola E, Etelaniemi V, Suortti P et al. J. Appl. Cryst, 1990, **23**: 35—42
- 9 Suortti, Fiedler P, Bravin S et al. J. Synch. Rad., 2000, **7**: 340—347
- 10 Thomlinson W. Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi', Course CXXVIII. Ed Burattini E, Balerna A. Amsterdam: IOS Press, 1996. 127—153

Double Laue-Crystal Monochromator for an X-Ray Imaging Beamline with Synchrotron Radiation^{*}

HU Wen XIE Hong-Lan DU Guo-Hao XIAO Ti-Qiao¹⁾

(Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Institute of Applied Physics, CAS, Shanghai 201800, China)

Abstract A new optical configuration of monochromator for X-ray imaging beamline, which allows one to obtain a parallel monochromatic beam with fixed exit by using two asymmetrically cut bent-crystals in Laue geometry, has been proposed. Based on the W14 multi-pole wiggler at SSRF, a preliminary design for the monochromator has been presented. The tunable photon energy range is 19—120keV, the flux output and flux density is 1.9×10^{13} phs/s@33keV and 3.8×10^{10} phs/s/mm²@33keV respectively. The flux and energy resolution of the monochromator is estimated, which indicates that the heat-load is tolerable and the design meets the demands of the X-ray imaging experiments. The results show that the new configuration of monochromator, compared with traditional design in double flat-crystal, is more powerful in dealing with the high flux and high heat-load.

Key words X-ray imaging, synchrotron radiation, Laue-crystal, monochromator design

Received 27 September 2006

^{*} Supported by Program of National Nature Science Foundation of China (10505028)

1) E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn