

同步辐射聚焦光束能量带宽的检测方法

李闯^{1,3}, 刘孟廷^{1,4}, 张增艳^{1,2}, 薛莲^{1,2}, 张艳³, 罗红心^{1,2}, 李炯^{1,2*}, 李中亮^{1,2**}

¹中国科学院上海应用物理研究所上海光源, 上海 201800;

²中国科学院上海高等研究院上海光源, 上海 201204;

³上海海事大学物流工程学院, 上海 201306;

⁴中国科学院大学, 北京 100049

摘要 利用晶体高指数面的衍射消除了分析晶体带宽及聚焦光束角发散的影响, 提出了聚焦条件下光束能量带宽的检测方法。采用 DuMond 图解析了光束能量带宽的测量过程, 并在上海光源硬 X 通用谱学线站搭建了检测系统。在相同能量和衍射角条件下, 利用晶体的不同高指数面分别测量了聚焦光束的能量带宽; 当光束能量为 10 keV 时, 利用 Si(555) 测量了准直镜压弯过程中光束能量带宽的变化, 消色散配置时测得光束能量带宽最佳值为 1.50 eV, 与 Shadow 程序追迹计算的 1.40 eV 相比, 差值控制在 10% 以内。结果表明, 晶体的高指数面衍射可用于同步辐射聚焦光束能量带宽的高精度测量。

关键词 X 射线光学; 聚焦光束的能量带宽; 晶体高指数面; 消色散和色散配置; DuMond 图

中图分类号 O434.1

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.1934001

Method for Energy Bandwidth Measurement of Synchrotron Radiation Focused Beam

Li Chuang^{1,3}, Liu Mengting^{1,4}, Zhang Zengyan^{1,2}, Xue Lian^{1,2}, Zhang Yan³,
Luo Hongxin^{1,2}, Li Jiong^{1,2*}, Li Zhongliang^{1,2**}

¹Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Institute of Apply Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

²Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China;

³Logistics Engineering College, Shanghai Maritime University, Shanghai 201306, China;

⁴University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract The influences of the analyzed crystal bandwidth and the angular divergence of focused beams were eliminated by the high-index lattice plane diffraction, and a method for energy bandwidth measurement of focused beams was proposed. In addition, a DuMond diagram was used to analyze the measurement process of energy bandwidth, and a detection system was built on the hard X-ray spectroscopy beamline at the Shanghai Synchrotron Radiation Facility. Furthermore, the different high-index lattice planes of crystals were employed for the energy bandwidth measurement of focused beams under the same energy and diffraction angle. Besides, in the context of 10 keV beam energy, the change of energy bandwidth during the bending process of the collimating mirror was measured by Si(555) and the optimal energy bandwidth measured in the non-dispersive configuration of Si(555) was 1.50 eV, with a difference of less than 10% from the calculated value (1.40 eV) by the Shadow tracker. The results demonstrate that the high-index lattice plane diffraction of crystals can be used for the high-precision energy bandwidth measurement of synchrotron radiation focused beams.

Key words X-ray optics; energy bandwidth of focused beam; high-index lattice plane of crystal; non-dispersive and dispersive configuration; DuMond diagram

OCIS codes 340.7480; 340.1365

收稿日期: 2020-06-01; 修回日期: 2020-06-10; 录用日期: 2020-06-23

基金项目: 国家自然科学基金(11505279, 11805259)、中国科学院 2018 青年创新促进会(2018297)

* E-mail: lijiong@zjlab.org.cn; ** E-mail: lizhongliang@zjlab.org.cn

1 引 言

同步辐射光束线的主要性能指标包括能量范围、光子通量、光斑尺寸和能量带宽^[1-4],其中光束线的能量范围、光子通量和光斑尺寸可直接测量。由于X射线晶体衍射中能量(波长)与角度的耦合现象,光束线能量带宽的直接检测较为困难。目前,通常使用氩、氮等气体样品中的固有能级结构来表征软X光束线的能量带宽^[5]。硬X光束线常用的能量带宽测量方法有两种:一是利用单色器第一晶体或第二晶体摇摆曲线的半峰全宽(FWHM)来表征光束线能量带宽^[6];二是利用Cu元素的K吸收边(8.914 keV)来测量光束线的能量带宽^[7]。上述硬X光束线能量带宽的两种检测方法均存在着不足之处:单色器晶体的摇摆曲线是光束线上的设备对自身性能的标定,这有悖于计量标定需要采用第三方设备测量的原则,而且单色器晶体的品质以及同步辐射的高热负载会影响晶体的摇摆曲线;Cu元素的K吸收边的宽度为2 eV,比光束线的能量带宽1.8 eV稍大,仅适合光束线带宽的定性测量^[8]。因此,光束线能量带宽的高精度定量表征需要借助与光束线上装备无关且具有较高能量分辨的分析器。

完美单晶硅可作为高分辨的分析器测量出射光束的摇摆曲线,从而实现光束线能量带宽的表征。在测量过程中,由于X射线晶体衍射角度与能量的耦合关系,光束发散角影响光束摇摆曲线的测量结果。为消除光束发散角的影响,杨俊亮等^[9]将Si(111)分析晶体与单色器晶体按色散/非色散空间位置关系布置,并通过调整白光狭缝垂直方向的开口尺寸,精确测量了上海光源X光学测试线的能量带宽。为提升专用于科学实验的光束线的能量分辨率,通常在单色器前配置准直镜,在垂直方向对光束进行准直处理。准直镜面形影响出射光束的发散角,而准直镜的面形受重力、压弯机构及热负载等多种不确定因素的影响^[10-12],因此无法使用准直镜定量调节光束的发散角以实现角度与能量的解耦,进而也就无法准确测得光束线的能量带宽。为提高同步辐射光束线的光子通量密度,通过在单色器后配置超环面聚焦镜,使光束在水平和垂直两个方向上聚焦^[13-14],光束聚焦不会改变光束的能量带宽,但是聚焦光束的发散角会影响光束摇摆曲线的测量。常规光束线出射时,所有的光学元件均在工作位置,采用晶体实验配置并调节狭缝的方法无法消除分析晶体带宽的影响。因此,需要建立聚焦条件下高精度

的光束能量带宽的检测方法。

本文利用晶体的高指数面衍射来提升光束线能量带宽的检测精度,高指数面的达尔文带宽降低了晶体带宽的影响,高指数面的衍射窗口趋近于垂直光束发散角展宽的方向,从而减小了聚焦光束角发散的影响。利用DuMond图^[15]解析了各指数面对光束线能量带宽测量的影响,在上海光源硬X射线通用谱学线站搭建了检测系统,验证了高指数面测量光束线能量带宽的效果。

2 光束线能量带宽的 DuMond 图解

利用分析晶体测量光束线的能量带宽,是根据X射线在晶体中发生衍射时,出射光束的能量与入射角度满足布拉格衍射定理,其表达式为

$$2d \sin \theta_B = \lambda_B, \quad (1)$$

式中: d 为分析晶体的晶格面间距; θ_B 为衍射的布拉格角; λ_B 为X射线的波长。X射线能量与波长的关系为

$$\lambda_B = 12.4/E, \quad (2)$$

式中: E 为该波长对应的X射线的能量。(1)式的微分式为

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda_B} = \frac{\Delta \theta}{\tan \theta_B}, \quad (3)$$

式中: ΔE 为X射线的能量带宽; $\Delta \lambda$ 为X射线的波长带宽; $\Delta \theta$ 为X射线摇摆曲线的带宽。(3)式中的 E 、 λ_B 和 θ_B 的关系恒定,因此 ΔE 、 $\Delta \lambda$ 、 $\Delta \theta$ 均可表征光束的能量带宽。其中, ΔE 、 $\Delta \lambda$ 的直接精确测量比较困难,原因是探测器的能量分辨率不能满足检测需求; $\Delta \theta$ 则可利用高分辨分析晶体进行直接测量,因此通过测量 $\Delta \theta$ 可获取光束线能量带宽。测量时通过转动分析晶体,获得不同衍射角对应的光束强度的变化,并用探测器进行记录。利用分析晶体测量 $\Delta \theta$ 时,晶体衍射并不能区分光束的能量带宽和角发散,因此在测量聚焦光束线的能量带宽时,需要消除光束角发散的影响。采用晶体高指数面的衍射测量光束线的能量带宽,高指数面的衍射窗口趋近于垂直光束发散角展宽的方向,从而降低光束角发散的影响。采用DuMond图可以对基于晶体高指数面衍射测量聚焦光束能量带宽的过程进行分析。

2.1 光束线的 DuMond 图解

DuMond图作为多晶衍射的常用解析方法,其原理是根据布拉格衍射方程中能量与波长的关系来定性分析光束线带宽的含义。根据X射线晶体动力学衍射理论可知,在衍射的达尔文带宽内可发生

全反射现象,即使完全平行的光束入射,衍射波中也会出现一个出射波长的带宽。完美晶体反射时的 DuMond 图如图 1 所示,其中 θ 为入射角, λ 为衍射光束的波长。当光束有一定的角发散和频谱分布时,衍射光束的波长和角度也有相应的展宽。在图 1 中,晶体的最小接收角是晶体的达尔文带宽 ω_D ,完美晶体反射时衍射光束的能量窗口 $\Delta\lambda_D$ 与晶体的本征达尔文带宽相同;如果入射光束存在一定的角发散,则衍射光束的能量窗口取决于图 1 中的 θ_s (θ_s 表示光束发散角与带宽的卷积),光束的能量带宽响应也会有一定的展宽 $\Delta\lambda_s$ 。

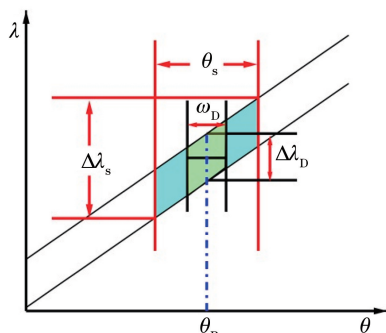


图 1 完美晶体衍射的 DuMond 图

Fig. 1 DuMond diagram for perfect crystal diffraction

使用分析晶体测量光束线的带宽 $\Delta\theta$,也就是测量能量窗口对应的 ω_D 或 θ_s 。带宽的测量结果是分析晶体达尔文带宽和能量窗口的卷积,当利用晶体的高指数面衍射测量经过准直的光束带宽时,高指数面较窄的达尔文带宽会减小带宽测量结果中分析晶体的影响。光束的聚焦及分析晶体与单色器晶体衍射角的不匹配都会使光束出现角发散,在利用高指数面衍射进行检测时,衍射光束的 DuMond 曲线随着衍射角的增大而接近垂直于纵轴方向,这表明衍射波带宽对光束横向角发散的敏感度降低。

当利用晶体进行光束线带宽检测时,分析晶体与单色器晶体形成双晶 X 射线衍射结构。其中,满足衍射条件的两块晶体的配置有消色散和色散两种:当两块晶体表面的法线位于第一晶体衍射线或第二晶体的入射线的两侧时为消色散配置;当两块晶体表面的法线位于第一晶体衍射线或第二晶体的入射线的同侧时为色散配置。晶体消色散和色散的配置分别用(+, -)和(+, +)来表示,两块具有相同指数面的晶体用(m, m)表示,两块具有不同指数面的晶体用(m, n)表示。

上海光源储存环的特征能量为 10.35 keV,通常选择 10 keV 的能量对光束线的各项性能指标进

行检测验收。以 Si(111)作为分析晶体,在 10 keV 处测量光束线带宽的 DuMond 图,如图 2 所示,其中分析晶体与单色器晶体的消色散和色散的配置分别表示为(+m, -m)和(+m, +m),DCM 表示双晶单色器。在消色散配置中,Si(111)分析晶体的衍射角与单色器晶体的衍射角大小相同,通过转动分析晶体,使分析晶体的窗口沿着出射光束窗口的短边运动,测量得到的结果为分析晶体的达尔文带宽与光束带宽的卷积。在分析晶体色散配置下的 DuMond 图中,分析晶体与检测光束有大于 90° 的夹角,分析晶体的窗口沿着出射光束窗口的长边移动,摇摆曲线的测量结果为分析晶体达尔文带宽、光束带宽及光束发散角的卷积。上述分析结果表明,采用 Si(111)作为分析晶体时,光束发散角影响色散配置下的摇摆曲线测量结果;在消色散和色散配置下,测量结果中都存在分析晶体达尔文带宽与光束带宽的卷积。

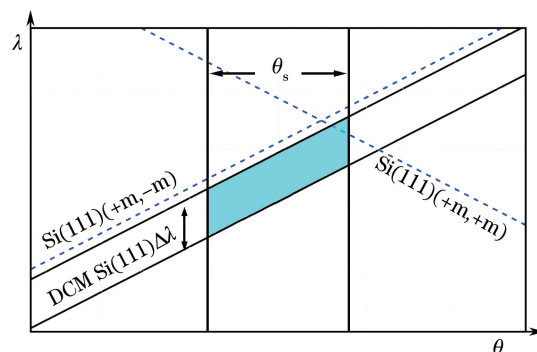


图 2 Si(111)色散和消色散配置下测量的光束线能量带宽的 DuMond 图

Fig. 2 DuMond diagram of energy bandwidth under Si(111) non-dispersive and dispersive configurations

2.2 晶体高指数面衍射

根据 X 射线晶体衍射的理论可知,Si(111)晶体中满足衍射条件的高指数面有(333)、(444)、(555)、(777)、(888)和(999),即 Si(111)分析晶体有六个高指数衍射面可应用于光束线能量带宽的检测^[16]。晶体的高指数面有两方面的优势,一是具有极窄的达尔文带宽,二是具有较高衍射角,利用 DuMond 图解析基于晶体的高指数面衍射测量光束线能量带宽的过程。

利用分析晶体测量光束线能量带宽时,首先考虑的因素是晶体的达尔文带宽。上海光源光束线性验收时能量指标通常选择 10 keV,在该能量下,(555)是上述高指数面中可以衍射出光的最高指数面,Si(555)在 10 keV 处对应的布拉格角和达尔文

带宽分别为 81.33° 和 $2.53''$, 测量的光束线能量带宽的 DuMond 图解如图 3 所示。Si(555) 的带宽为 0.02 eV , 相对于光束线的能量带宽 1.40 eV , Si(555) 晶体的出射光束可以看作准单色光。在晶体高指数面衍射色散和消色散配置下, 测量得到的光束线的能量带宽略有差异, 但是理论上两种实验配置均可用于光束线带宽验收。

在光束线能量带宽的测量中, 光束的发散角对结果的影响主要与晶体的衍射角相关。但是当光子能量为 10 keV 时, Si(111) 晶体的高指数面 (777)、

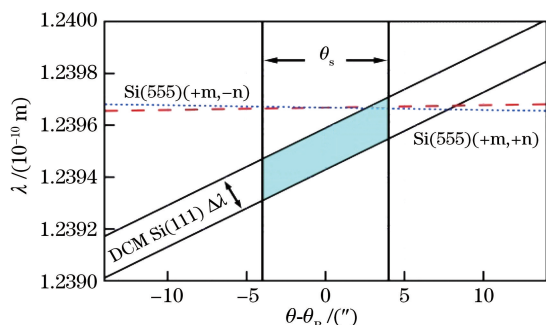


图 3 Si(555) 色散和消色散配置下测量的光束线能量带宽的 DuMond 图

Fig. 3 DuMond diagram of energy bandwidth under Si(555) non-dispersive and dispersive configurations

(888)、(999) 无法衍射出光, 为了充分利用上述高指数面, 需要选择更高能量的 X 射线。当 Si(999) 的衍射角为 81.33° 时, 对应的光子能量是 18 keV , 且该能量在 Si(111) 单色器的工作能量范围内 ($5 \sim 20 \text{ keV}$), 即光束线可以提供 18 keV 的单色光, 在该能量下用 DuMond 图分析基于高指数面衍射测量得到的光束线带宽。

图 4 为晶体在光子能量 18 keV 处的能量带宽和达尔文带宽, 横轴为布拉格角, 左右纵轴分别为能量带宽和达尔文带宽, 其中曲线上各点从左往右依次对应单晶硅的 (111)、(333)、(444)、(555)、(777)、(888)、(999) 指数面, 图中还给出了 Si(111)、Si(555)、Si(999) 在 18 keV 处的反射率曲线。晶体的布拉格角随着晶体衍射面指数的增加而增大, Si(777) 的达尔文带宽最低, 晶体的布拉格角和达尔文带宽决定了晶体的能量带宽。根据 (3) 式计算得到的晶体能量带宽也是随着布拉格角的增加而降低, 能量带宽降低的速率远大于达尔文带宽的降低速率, 晶体的高衍射角是能量带宽降低的主要因素。最高指数面 (999) 所对应的能量带宽为 0.005 eV , 远小于 Si(111) 晶体的带宽 2.56 eV , 因此 Si(999) 分析晶体可看作是准单色的分析器。

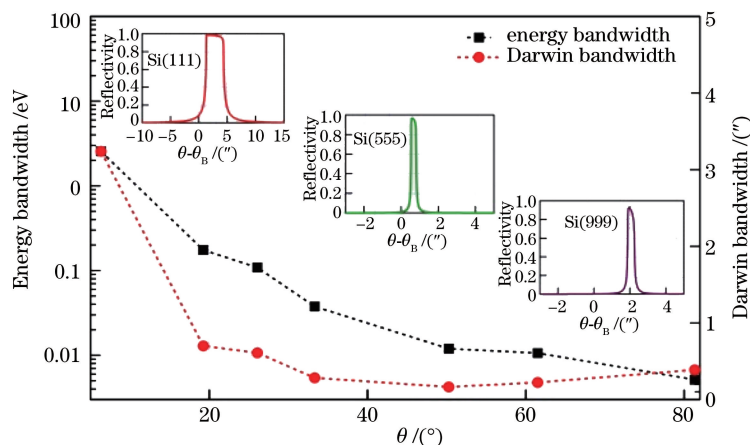


图 4 当光子能量为 18 keV 时晶体的能量带宽和达尔文带宽

Fig. 4 Energy bandwidth and Darwin bandwidth of crystal when photon energy is 8 keV

同步辐射光束的角发散分为两种: 一是同步辐射光源的角发散, 该角发散会造成单色器出射光束的带宽增大; 二是单色光聚焦时产生的角发散, 该角发散并不影响光束的带宽。第一种角发散可以通过光束线的光学设计消除, 在单色器前配置准直镜来平行化垂直方向的光束, 经过准直后的光束发散角可限制在 $0.41''$ 以内; 第二种角发散是提高样品处的光子通量密度的必然结果, 而且在用分析晶体测

量光束的摇摆曲线时会增加测量值。晶体高指数面衍射对两种角发散均比较敏感, 利用 DuMond 图对不同晶体高指数面下测量光束线能量带宽的过程进行解析。

不同晶体高指数面下测量光束线能量带宽的 DuMond 图如图 5 所示, 横轴为布拉格角, 纵轴为光束的波长。图 5 分别给出了单色器 Si(111) 晶体及分析晶体 (333)、(555)、(999) 指数面的带宽, 且晶

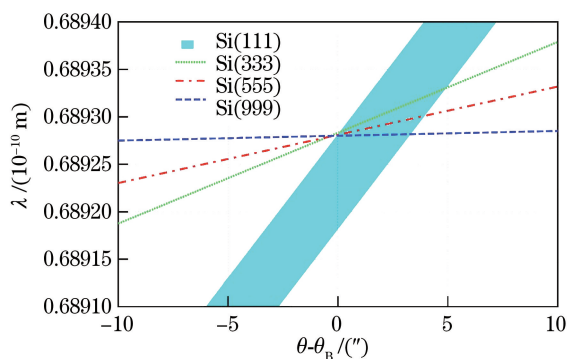


图 5 晶体高指数面衍射的 DuMond 图
Fig. 5 DuMond diagram of high-index lattice plane diffraction of crystal

体的带宽随着晶体衍射面指数的增加而降低；在出射光束的窗口内，光束聚焦后的能量带宽并未增加，但是对应的布拉格角存在一定的展宽。在准直条件下，出射光束的带宽经过聚焦镜后不发生改变，即图 5 中 $\Delta\lambda_D$ 的值不会改变，但是用分析晶体测量光束时能量宽度会变大。如图 5 所示，随着晶体衍射面指数的增加，同一能量下对应的布拉格角也变大，在图中表现为分析晶体衍射光束与纵轴的角度趋于 90° 。分析晶体衍射光束的布拉格角越大，角发散对光束的摇摆曲线测量结果的影响越小，因此在测量聚焦光束的带宽时，尽可能选择高指数面的晶体作为分析器，减少聚焦光束的角发散对带宽测量的影响。

3 光学布局及实验过程

上海光源线站工程中的硬 X 射线通用谱学线

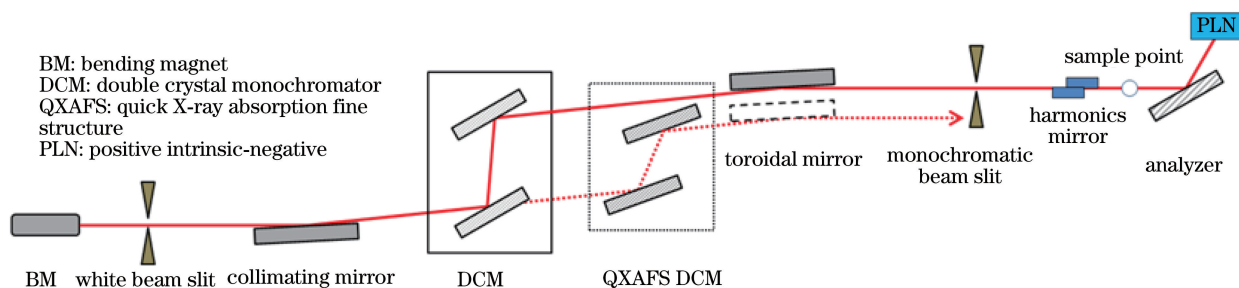


图 6 硬 X 通用谱学线站的光学布局图
Fig. 6 Optical layout of hard X-ray spectroscopy beamline

在线搭建的检测系统如图 6 所示，分析晶体位于样品点的下游 0.5 m 处，且被安装在重复精度为 $0.025''$ 的转动扫描机构上 (KTG-16W, KOHZU, Japan)。X 射线探测器为光电二极管 PIN (S3584-08, Hamamatsu, Japan)，其探测面积为 $28\text{ mm} \times 20\text{ mm}$ ，探测范围可覆盖分析晶体转动过程中衍射光束的角度范围，通过电流表记录 (6485, Keithley,

站(11B)是一条弯铁线站，其中 X 射线吸收精细结构(XAFS)是主要研究方法。XAFS 实验对光束的能量分辨率要求较高，其分辨率应小于待测元素吸收边的自然带宽，元素 K 吸收边的自然带宽大约为光子能量的 0.02% ，而 L 吸收边的自然带宽为光子能量的 0.04% 。因此，为了满足 XAFS 实验的要求，光束线的能量分辨率 $\Delta E/E$ 要小于 2×10^{-4} ，即光束线在 10 keV 的能量带宽为 2 eV 。

硬 X 通用谱学线站的光学布局如图 6 所示，光束线的光源由 11B 的弯转磁铁引出。白光狭缝距离光源 18.2 m ，将光束线的最大接收角限制为 $1.5\text{ mrad} \times 0.17\text{ mrad}$ ；准直镜距离光源 19.65 m ，用于垂直方向光束的平行化；光束线的核心装备双晶单色器距离光源 22.55 m ，用 Si(111) 双晶在 $4 \sim 20\text{ keV}$ 的能量范围内输出具有一定带宽的单色光。在光束线光路上还配备了一台毫秒级时间分辨的快扫单色器，其位于双晶单色器下游 3 m 处；超环面聚焦镜距离光源 27.5 m ，在水平和垂直两个方向对单色器出射光束进行聚焦处理。实验站的样品点距离光源点 41.25 m ，分析晶体被安装在样品点的下游。光束线的准直镜和超环面聚焦镜需工作在光路中，同步辐射光束才能出射到实验站，因此需要在聚焦条件下测量光束线的能量带宽。根据实验需求，双晶单色器和快扫单色器可以切换工作，为了使测量方法更具通用性，本文测量双晶单色器工作时的光束线能量带宽。

USA) X 射线的强度。运动控制及数据采集的程序是基于 LabView 编写的软件。

按照图 6 搭建消色散配置的实验光路，使用 Cu 元素的 K 吸收边校正双晶单色器的工作能量，使光束线的出射光束能量为 10 keV 。首先使用 Si(111) 分析晶体测量光束线带宽，并将其作为晶体高指数面测量结果的参考值。具体过程如下：1) 将光束线

的 光 学 元 件 调 整 至 10 keV 下 的 最 佳 状 态; 2) 调 整 分 析 晶 体 布 拉 格 角, 使 其 满 足 衍 射 条 件; 3) 通 过 转 动 分 析 晶 体, 测 量 出 射 光 束 的 摇 摆 曲 线。 根 据 上 述 理 论, 将 Si(111) 晶 体 旋 转 180° 至 色 散 配 置, 重 复 步 骤 2)、 3) 测 得 色 散 配 置 下 的 摇 摆 曲 线。

其 次 测 量 不 同 指 数 面 对 聚 焦 光 束 角 发 散 的 抑 制 作 用, 分 相 同 能 量 和 相 同 衍 射 角 两 种 情 况。 在 相 同 能 量 条 件 下, 先 将 光 束 线 的 工 作 能 量 调 整 至 18 keV, 分 别 用 Si(333)、 Si(444)、 Si(555)、 Si(777)、 Si(888) 和 Si(999) 按 照 上 述 步 骤 2)、 3) 在 消 色 散 条 件 下 测 量 光 束 的 摇 摆 曲 线。 在 相 同 衍 射 角 条 件 下, 选 择 晶 体 的 布 拉 格 角 为 81.33°, 分 别 在 色 散 和 消 色 散 配 置 下 测 量 光 束 线 带 宽, 按 照 上 述 步 骤 测 量 6, 8, 10, 14, 16, 18 keV 能 量 下 的 摇 摆 曲 线。

最 后 利 用 晶 体 高 指 数 面 测 量 光 源 发 散 角 对 出 射 光 束 带 宽 的 影 响, 即 通 过 调 整 准 直 镜 的 压 弯 半 径 测 量 光 束 带 宽 的 变 化。 在 10 keV 条 件 下, 使 用 Si(555) 分 析 晶 体 在 消 色 散 配 置 下 测 量 光 束 的 能 量

带 宽。 具 体 过 程 如 下: 首 先 调 整 双 晶 单 色 器 和 Si(555) 分 析 晶 体, 使 其 满 足 10 keV 下 的 衍 射 条 件; 然 后 将 准 直 镜 调 整 至 完 全 放 松 状 态, 开 始 逐 步 压 弯 准 直 镜, 随 着 准 直 镜 压 弯 半 径 的 减 小, 电 机 步 长 由 500 μm 降 至 50 μm, 在 压 弯 电 机 每 次 运 动 后, 静 止 30 min 等 待 结 构 应 力 释 放 后, 利 用 分 析 晶 体 测 量 光 束 的 摇 摆 曲 线; 最 后 将 准 直 镜 调 整 至 最 佳 的 状 态, 利 用 分 析 晶 体 在 色 散 配 置 下 测 量 光 束 的 摇 摆 曲 线。

4 数 据 分 析 及 讨 论

利 用 光 学 追 迹 程 序 Shadow 对 硬 X 通 用 谱 学 线 站 的 能 量 带 宽 进 行 模 拟 追 迹, 结 果 如 图 7 所 示。 在 光 束 线 准 直 镜 的 面 形 误 差 为 1.5 μrad, 单 色 器 第 一 晶 体 热 变 形 为 5 μrad 的 条 件 下, 光 束 线 输 出 的 能 谱 带 宽 是 1.40 eV, 如 图 7(a) 所 示, 对 应 的 角 度 带 宽 为 5.82"。 光 束 焦 点 处 的 发 散 角 分 布 如 图 7(b) 所 示, 其 中 α' 为 光 束 垂 直 方 向 的 发 散 角, 模 拟 计 算 的 结 果 为 210 μrad(43.32")。

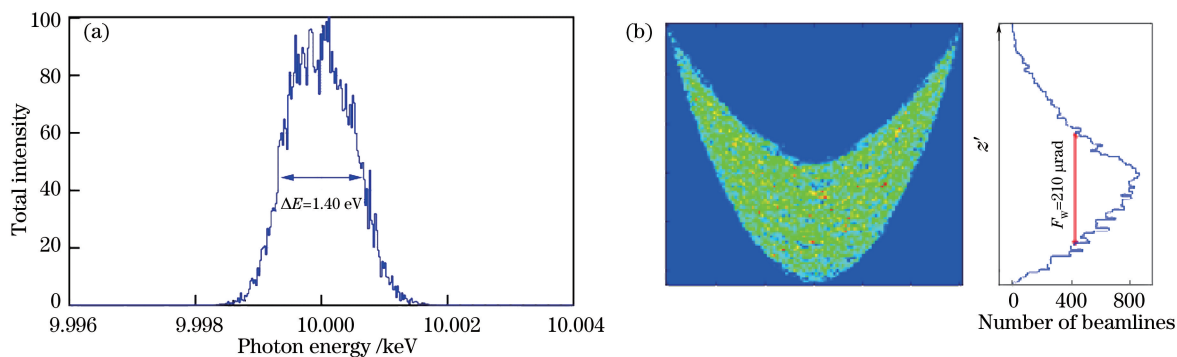


图 7 Shadow 追 迹 计 算 的 结 果。(a) 光 束 线 的 能 量 带 宽; (b) 焦 点 处 光 斑 的 发 散 角

Fig. 7 Calculation result by Shadow tracker. (a) Energy bandwidth of beamline; (b) divergence angle at focal point

利 用 Si(111) 分 析 晶 体 测 量 得 到 的 光 束 摇 摆 曲 线 如 图 8 所 示, 其 中 (+m, -m) 和 (+m, +m) 分 别 表 示 消 色 散 配 置 和 色 散 配 置 下 的 测 量 结 果, F_w 为 半 峰

全 宽, θ_1 为 分 析 晶 体 的 转 动 角 度。 利 用 高 斯 函 数 拟 合 得 到 的 半 峰 全 宽 分 别 为 35.07" 和 41.62", 上 述 测 量 结 果 远 大 于 Shadow 追 迹 得 到 的 光 束 线 角 度 带 宽 5.82"。

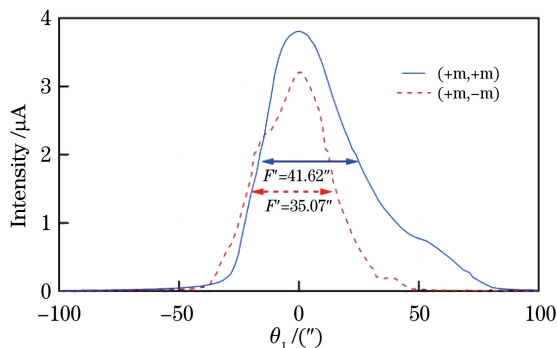


图 8 Si(111) 分 析 晶 体 测 量 得 到 的 摇 摆 曲 线

Fig. 8 Rocking curves measured by Si(111) analyzed crystal

摇摆曲线半峰全宽变大的原因是聚焦光束的发散角影响了测量结果,摇摆曲线的半峰全宽接近 Shadow 模拟的垂直方向上的发散角 $43.32''$ 。图 8 中的摇摆曲线不是标准的高斯曲线,这主要是因为超环面镜聚焦光斑的不均匀分布。因此, Si(111) 分析晶体无法满足聚焦光束带宽的检测要求。

在 18 keV 光子能量的条件下,用晶体高指数面测量得到的摇摆曲线半峰全宽如图 9 所示,其中横轴为晶体衍射的布拉格角,左右纵轴分别为摇摆曲线的半峰全宽 (F') 和光束线的能量带宽。随着布拉格角(指数面)的增加,摇摆曲线的半峰全宽增大,与 DuMond 图分析的结果相吻合,即测量得到的摇摆曲线半峰全宽与晶体布拉格角的正切值成反比。随着布拉格角的增加,能量带宽的测量值减小,光束中角发散的影响逐渐减弱。基于晶体(999)指数面测得的光束线的能量分辨率为 1.53×10^{-4} ,该值接近理论值 1.42×10^{-4} 。总之,晶体的高指数面衍射较好地抑制了聚焦光束角发散的影响,测量结果能更加真实地表征光束线的带宽。

当衍射角为 81.3° 时,晶体高指数面色散和消色散配置下的测量结果如图 10 所示。可以看出,消色散配置下的测量值小于色散配置下的结果,两种

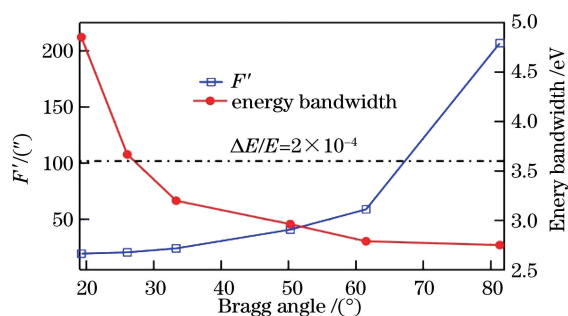


图 9 当光子能量为 18 keV 时基于晶体不同指数面的测量结果

Fig. 9 Measurement results based on different lattice planes of crystal when photon energy is 18 keV

实验配置下的测量结果均优于光束线设计指标,即各能量对应的能量分辨率高于 2×10^{-4} ,其中消色散配置下的测量结果更接近晶体衍射的理论值,因此采用消色散配置可以更好地抑制聚焦光束的角发散。当光子能量为 10 keV 时测量得到的摇摆曲线的半峰全宽最低,原因是同步辐射光源的角发散与光子能量相关,光束线的准直镜和聚焦镜等光学元件的弯曲半径与光源的发散角相匹配,当偏离该能量值时单色器衍射光束的带宽和发散角相应增大,从而引起光束摇摆曲线测量值的增加。

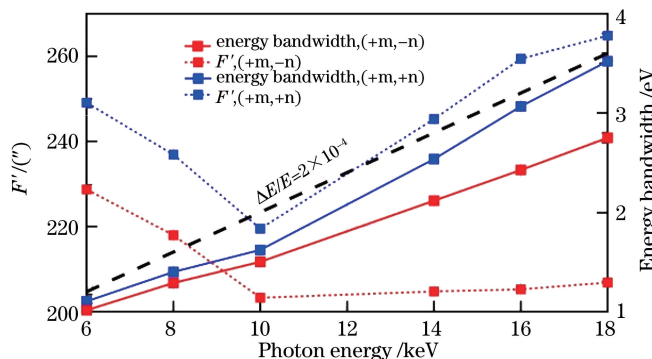


图 10 相同布拉格角下摇摆曲线的变化

Fig. 10 Variance of rocking curve under same Bragg angle

在 10 keV 的光子能量条件下,准直镜压弯电机位移与 F' 和峰值通量的关系如图 11 所示,横轴为压弯电机的位移,左右纵轴分别为出射光束的峰值通量及摇摆曲线的半峰全宽。准直镜的半径随着压弯电机位移的增加而减小,由图 11 可以看出,摇摆曲线的半峰全宽随准直镜半径的减小而降低,当电机的位移在 9.5 ~ 10 mm 范围内时,摇摆曲线的半峰全宽变化值在 5% 以内,即准直镜在较宽的运动范围内保证出射光束的带宽变化较小。图 11 中摇摆曲线的半峰全宽与光子通量的极值有一定的错

位,即光束线的能量分辨率为最佳时,出射光束的通量并不是极大值,原因是同步辐射的高热负载使单色器第一晶体产生热变形,当光束的发散角与晶体热变形耦合时,出射光束的光子通量达到极值。因此,高指数面晶体可以定量地评价光源角发散的影响。

当光束线的准直镜调整至最佳状态时, Si(555) 分析晶体在消色散和色散配置下测量得到的光束线摇摆曲线如图 12 所示。可以看出,在消色散和色散配置下,摇摆曲线的半峰全宽分别为 $20.33''$ 和

21.95", 根据(3)式计算得到的光束线带宽分别为 1.50 eV 和 1.62 eV, 二者均优于设计要求的 2 eV, 其中消色散配置下的测量结果与 Shadow 理论计算

结果 1.40 eV 的差值小于 10%。因此, 晶体高指数面的衍射可以精确表征聚焦光束的能量带宽, 满足同步辐射光束线工艺验收的要求。

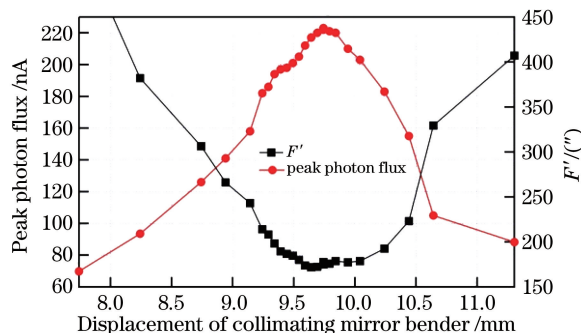


图 11 准直镜压弯电机位移与 F' 和峰值通量的关系

Fig. 11 Relationship among collimating mirror bender displacement, F' and peak photon flux

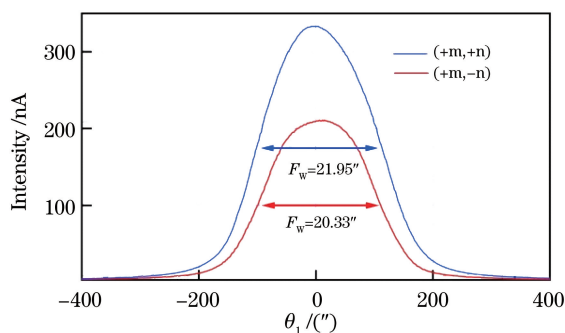


图 12 当光子能量为 10 keV 时 Si(555) 分析晶体测量得到的摇摆曲线

Fig. 12 Rocking curves measured by Si(555) analyzed crystal when photon energy is 10 keV

5 结 论

基于晶体的高指数面衍射, 提出了同步辐射光束线带宽的检测方法, 实现了聚焦光束能量带宽的高精度检测。使用 DuMond 图分析了高指数面晶体的达尔文带宽及衍射角对光束线带宽的影响。高指数面晶体的达尔文带宽比光束线能量带宽低两个量级, 因此可以用分析晶体测量光束线的出射光束摇摆曲线。基于高指数面晶体的高衍射角, 分析晶体的出射窗口以接近垂直于能量轴的方式扫描光束线的出射窗口, 该条件下出射光束的摇摆曲线对聚焦光束的角发散不敏感, 测量结果仅取决于光束线的带宽。高指数面晶体的色散和消色散的配置对测量结果有一定的影响, 但是测量结果都在光束线设计要求的范围内。硬 X 通用谱学线站实验验证了 DuMond 图的分析结果: 在相同能量 18 keV 条件下, 测量得到的光束线带宽随着晶体布拉格角的增大而降低; 在相同的衍射角 81.33° 条件下, 测量得到的带宽值均优于光束线的设计要求 2×10^{-4} ; 利用晶体高指数面衍射可实现对光束线准直镜压弯过

程中能量带宽的定量表征, 从而得到出光束线的最佳能量分辨率。最后, 利用 Si(555) 分析晶体在消色散配置下得到的测量结果为 1.50 eV, 与 Shadow 追迹结果 1.40 的差值小于 10%。

致 谢 感谢中国科学院北京高能物理研究所张小威研究员给予的理论和实验指导, 感谢中国科学院北京高能物理研究所博士生杨俊亮参与实验讨论。

参 考 文 献

- [1] Xu H J. Design and development of the phase-I beamline at Shanghai Synchrotron Radiation Facility. Chinese standard book number: 978-7-5478-2468-9/O.44 [S]. Shanghai: Shanghai Scientific & Technical Publishers, 2015.
徐洪杰. 上海光源首批线站设计与研制. 中国标准书号: 978-7-5478-2468-9/O.44 [S]. 上海: 上海科学技术出版社, 2015.
- [2] Yi R Q, Zhao Y D, Wang Q P, et al. Characteristic study and application of the soft X-ray beamline 4B7B on BSRF [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(10):

1034002.
易荣清, 赵屹东, 王秋平, 等. 北京同步辐射装置 4B7B 软 X 射线标定束线的性能研究及应用[J]. 光学学报, 2014, 34(10): 1034002.
- [3] Hu T, Hua W Q, Wang Y D, et al. Small-angle X-ray scattering tomography based on micro-focusing Kirkpatrick-Baez mirrors [J]. Acta Optica Sinica, 2018, 38(1): 0134001.
胡涛, 滑文强, 王玉丹, 等. 基于 Kirkpatrick-Baez 镜聚焦的 X 射线小角散射显微层析成像[J]. 光学学报, 2018, 38(1): 0134001.
- [4] Zhang W Z, Tang J C, Wang S S, et al. The protein complex crystallography beamline (BL19U1) at the Shanghai Synchrotron Radiation Facility[J]. Nuclear Science and Techniques, 2019, 30(11): 170.
- [5] Xue C F, Wang Y, Guo Z, et al. High-performance soft X-ray spectromicroscopy beamline at SSRF [J]. Review of Scientific Instruments, 2010, 81(10): 103502.
- [6] Dolbnya I, Sawhney K, Scott S M, et al. A water-cooled monochromator for the B16 Test beamline at the Diamond Light Source: capabilities and performance characterization [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2019, 26(1): 253-262.
- [7] Müller O, Nachtegaal M, Just J, et al. Quick-EXAFS setup at the SuperXAS beamline for *in situ* X-ray absorption spectroscopy with 10 ms time resolution [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2016, 23(1): 260-266.
- [8] Yu H S, Wei X J, Li J, et al. The XAFS beamline of SSRF [J]. Nuclear Science and Techniques, 2015, 26(5): 050102.
- [9] Yang J L, Li Z L, Li T, et al. Characteristics of multi-crystals configuration X-ray diffraction and application in characterizing synchrotron beamline bandwidth [J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(10): 104101.
杨俊亮, 李中亮, 李璐, 等. 多晶体光路配置的 X 射线衍射特性及在表征同步辐射光束线带宽上的应用 [J]. 物理学报, 2020, 69(10): 104101.
- [10] Yashchuk V V, Morrison G Y, Marcus M A, et al. Performance optimization of a bendable parabolic cylinder collimating X-ray mirror for the ALS micro-XAS beamline 10.3.2 [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2015, 22(3): 666-674.
- [11] Tian N X, Jiang H, Li A G, et al. Study on phase compensation mirror used for hard X-ray synchrotron radiation [J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(9): 0934001.
田纳玺, 蒋晖, 李爱国, 等. 用于同步辐射的硬 X 射线相位补偿镜的研究 [J]. 光学学报, 2020, 40(9): 0934001.
- [12] Nistea I, Alcock S G, Kristiansen P, et al. Long, elliptically bent, active X-ray mirrors with slope errors < 200 nrad [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2017, 24(3): 615-621.
- [13] Heald S M. Versatile focusing using a combination of toroidal and Kirkpatrick-Baez mirrors [J]. Review of Scientific Instruments, 2002, 73(3): 1527-1529.
- [14] Heald S M. Optics upgrades at the APS beamline 20-BM [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2011, 649(1): 128-130.
- [15] Dumond J W M. Theory of the use of more than two successive X-ray crystal reflections to obtain increased resolving power [J]. Physical Review, 1937, 52(8): 872-883.
- [16] Masiello F, Cembali G, Chumakov A I, et al. Rocking curve measurements revisited [J]. Journal of Applied Crystallography, 2014, 47(4): 1304-1314.