

# 第一讲 中子散射与散裂中子源\*

王芳卫<sup>1, †</sup> 严启伟<sup>1</sup> 梁天骄<sup>1</sup> 殷雯<sup>1</sup> 张泮霖<sup>1</sup>  
傅世年<sup>2</sup> 唐靖宇<sup>2</sup> 方守贤<sup>2</sup> 章综<sup>1</sup> 张杰<sup>1</sup>

(1 中国科学院物理研究所 北京 100080)

(2 中国科学院高能物理研究所 北京 100049)

**摘要** 中子散射是研究物质微观结构和动态的理想工具之一,广泛地应用于凝聚态物质研究和应用的众多学科领域.散裂中子源能是新一代的加速器基脉冲中子源,能为中子散射提供高通量的脉冲中子.文章简明地介绍了中子散射的特点和它作为物质结构和动态探针的优越性,以及散裂中子源的基本原理、发展状况和多学科的应用优势.我国计划建设的散裂中子源 CSNS 中靶站将由多片钨靶、铍/铁反射体和铁/重混凝土生物屏蔽体组成.质子束功率 100kW 下,脉冲中子通量约为  $2.4 \times 10^{16}$  n/cm<sup>2</sup>/s.第一期将设计建造高通量粉末衍射仪、高分辨粉末衍射仪、小角散射仪、多功能反射仪和直接几何非弹性散射仪等五台典型的中子散射谱仪,以覆盖大部分的中子散射研究领域.

**关键词** 中子散射,散裂中子源,靶站,中子谱仪

## Neutron scattering and spallation neutron sources

WANG Fang-Wei<sup>1, †</sup> YAN Qi-Wei<sup>1</sup> LIANG Tian-Jiao<sup>1</sup> YIN Wen<sup>1</sup> ZHANG Pan-Lin<sup>1</sup>  
FU Shi-Nian<sup>2</sup> TANG Jing-Yu<sup>2</sup> FAN Shou-Xian<sup>2</sup> ZHANG Zong<sup>1</sup> ZHANG Jie<sup>1</sup>

(1 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

(2 Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

**Abstract** Neutron scattering as a probe of microscopic structure and dynamics is a powerful tool for research in a wide variety of fields, and an accelerator-based spallation neutron source can supply high flux pulses for neutron scattering. The characteristics of neutron scattering, the principle and development of spallation neutron sources, and their advantages in multidisciplinary applications are summarized. In the proposed project of the Chinese Spallation Neutron Source the target station will consist of a piece-stacked tungsten target, a Be/Fe reflector and an Fe/heavy concrete bio-protected shelter. The pulsed neutron flux will be up to  $2.4 \times 10^{16}$  n/cm<sup>2</sup>/s under a nuclear power of 100 kW. Five neutron scattering instruments — a high flux powder diffractometer, a high resolution powder diffractometer, small angle diffractometer, multi-functional reflectometer and direct geometry inelastic spectrometer, will be constructed as the first step to cover most neutron scattering applications.

**Keywords** neutron scattering, spallation neutron source, target station, neutron instruments

## 1 引言

人类的文明史可以说是人类对自然资源的开发和利用的历史.新兴的高性能材料的发现和相应技术的广泛使用通常带来人类社会的革命性的飞跃和

发展.今天人类生活质量的提高更紧密地依赖于各

\* 中国科学院知识创新工程重要方向性项目(批准号:KJXC2-SW-W07)科技部国际合作重点项目(批准号:2002CB913903)和国家自然科学基金(批准号:10375088)资助项目

2004-10-28 收到初稿 2005-01-06 修回

† 通讯联系人. Email: fwwang@aphy.iphy.ac.cn

种体积更小、效率更高、反应更快的高性能材料. 科学研究表明, 原子、分子和原子分子团簇等的微观结构和动态与物质的宏观性质紧密相连. 人们在探索新物质的性能特征时, 首先要回答的就是物质的结构问题. 物质微观结构的表征成为理解物性的基础和出发点.

人们已发展了多种了解物质微观结构和动态的技术和方法, 其中最为重要的是利用 X 射线、中子、光和电子等的散射技术和核磁共振、电子自旋共振等磁共振技术. 这些技术各有特点, 覆盖不同的物质结构和运动的空间、时间区域, 互为补充(见图 1). 中子因其电中性、埃到亚微米范围的波长及与物质中各种动态能量相近的能量范围等特性, 成为研究物质微观结构和动态的理想工具. 半个多世纪以来, 中子散射技术在凝聚态物理和化学、电子器件、化学催化、蛋白质结构、微生物结构及储氢能源等众多学科领域中, 有着重要的应用<sup>[1]</sup>.

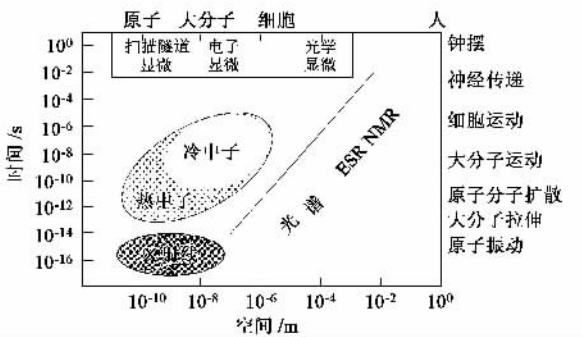


图 1 不同微观研究手段所覆盖的时间空间

## 2 中子散射

人类对物质结构在原子尺度上的认识可追溯到 20 世纪初, 德国物理学家劳厄和英国物理学家布拉格父子以其敏锐的物理思想, 创造性地发明了 X 射线衍射技术, 打开了探索微观世界的大门, 使人们能够测量而不是推测物质中原子的排列规律, 如原子间的距离和其空间位置之间的关系, 即对称性等. 现在大型第三代同步辐射装置能为物质结构的研究提供超强的 X 射线源, 不仅为 X 射线的物质结构研究拓展了空间(如样品量极少的薄膜、蛋白质单晶等), 同时也为开展物质结构的动态研究提供了方便. 但是, 正如其他所有有效工具一样, X 射线本身也有其局限性. 如 X 射线衍射难于精确测定物质中较轻原子的位置; X 射线能量过高, 难于研究物质中如原子分子的转动和振动、蛋白质折叠等相对能量

较低动态特征; 破坏生物样品的活性等. 中子散射, 这项新的技术可以弥补 X 射线的上述缺陷.

热中子的波长与物质中原子的间距相当, 可以像 X 射线一样用来探测物质的微观结构. 但是, 与 X 射线相比, 中子具有以下明显的特点<sup>[2]</sup>:

(1) 中子不带电荷, 是一中性粒子. 与物质相互作用时, 中子几乎不受原子核外电子的影响, 被散射的可能性主要取决于原子核的性质, 相互作用相对较弱. 这种相对弱的相互作用带来三个优势: 一是中子的穿透能力较强, 如对工业上常用的钢铁和铝的穿透分别为 0.7、6.5cm 左右. 因此, 中子散射是对大系统的统计结果, 研究的是体效应, 更容易接近研究对象本质. 而且易于加载高温、高压和强场等样品环境设备, 开展极端条件下物质结构和动态的研究. 二是中子对研究体系的扰动十分微弱, 其散射结果基本上可在量子力学一级微扰的框架内得到合理的解释, 便于与分子(晶格)动力学的数值模拟比较. 三是中子对物质的破坏很小, 更有利于研究生物活性体系. 但是, 物质对中子相对较弱的散射能力, 也限制了中子散射的研究范畴, 通常研究能获得较大样品量的材料体系.

(2) 中子散射长度与原子序数之间没有明显的函数关系, 随着原子序数增加, 中子散射长度或增或减, 或正或负(见图 2). 相对原子序数较大的重原子来说, 轻原子对 X 射线的散射微不足道, 然而对中子的散射却相差无几. 显然, 中子更容易精确确定轻原子的位置.

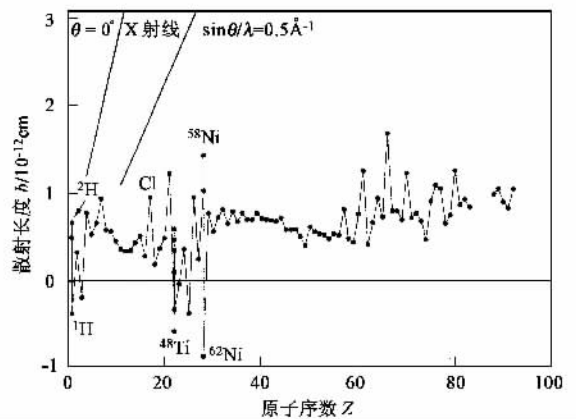


图 2 中子散射长度与原子序数的关系图

(3) 中子可以区分同位素. 同一元素的同位素, 其核外电子数完全相同, 对 X 射线的散射也基本相同. 但原子核内中子数的变化可以极大地影响其对中子的散射. 最具代表性和实用性的是氢的同位素

效应:氕( $^1\text{H}$ )的中子相干散射长度为  $-0.374 \times 10^{-12}\text{cm}$ ,并有十分明显的非相干散射,而氘( $^2\text{H}$ )的相干长度则为  $0.667 \times 10^{-12}\text{cm}$ ,非相干散射很弱.因此,可以在实验中进行同位素替换,对研究对象中的氢完全或部分氘化,从而准确确定氘原子或氘化官能团的位置和形态.人们常称之为同位素衬度法.该方法有利于研究储氢材料和富含氢原子的生物、有机材料等.

(4)核的中子散射能力与被散射中子的方向无关,没有像X射线一样的形状因子.因此高 $Q$ 值的中子散射强度十分明显,有利于研究物质中原子周围局部的细微变化,如高温超导等3d过渡族金属氧化物中的Jahn-Teller效应以及非晶、液态材料中短程原子关联等.

(5)中子有磁矩,磁性物质对它能产生磁散射,其散射强度与核散射强度相当.这样中子就可以直接探测物质微观磁结构.随着中子通量的增加和仪器精度的提高,尤其是极化中子技术的采用,不仅能测量局域磁矩的对称性,还可测量磁矩的空间密度的分布.

(6)中子的能量远低于相同波长的X射线,与凝聚态物质中大部分动态过程的能量相当.这种能量范围适合测量晶格振动、磁相互作用、原子分子扩散、有机和生物大分子的微观大运动(如聚合物的同构相变、蛋白质折叠)等多种动态过程的激发,从而更深刻地揭示物质的本质.

由于中子以上突出的特点,自1936年人们成功地进行了首次中子衍射实验以来,中子散射已广泛地应用到物理、化学、材料、生物、地质、能源、医疗卫生和环境保护等众多研究领域.美国沙尔(Clifford G. Shull)和加拿大布罗克豪斯(Bertram N. Brockhouse)教授因他们在中子散射领域内的开拓性工作<sup>[3,4]</sup>,获得1994年度诺贝尔物理学奖.

### 3 散裂中子源

中子与物质的相互作用较弱,中子散射通常需要高中子通量的中子源.能提供高通量的中子源主要有两类:反应堆和散裂源<sup>[5]</sup>.不管反应堆还是散裂源,产生的都是能量较大的快中子.为满足中子散射的要求,高能中子都需进入富含氢的介质,经多次碰撞后而减速慢化.典型的慢化器有水(300K)、液态甲烷(100K)、液氢(20K)等,对于反应堆还有石墨(2000K).

核反应堆是一种稳定连续的中子源,在中子散

射研究领域发挥了巨大的作用.其中子束通量由核反应的功率决定.通常使用 $^{235}\text{U}$ 作为核燃料,每次核裂变产生一个有效中子,而释放180MeV的热量.堆芯中如此大量的热量必须及时有效地带出,才能保证反应堆正常运行.正是因为堆芯散热条件的限制,反应堆中子通量在20世纪六七十年代就达到了饱和.目前,全球公认通量最高的中子散射研究用堆是法国的ILL(Grenoble),通量为 $\sim 1.5 \times 10^{15}\text{n/cm}^2/\text{s}$ .但是,随着科学技术的飞速发展,相应的研究体系如薄膜、纳米团簇、生物大分子和蛋白质等,尺度分布更大,获得数量在克量级的样品更为困难.因此,小样品的快速、高分辨的中子散射测量迫切需要新一代通量更高、波段更宽的中子源.这样,散裂中子源就应运而生.图3所示为中子源发展趋势.显然,脉冲散裂中子源突破了反应堆中子源的中子通量的上限,正快速地向发展.

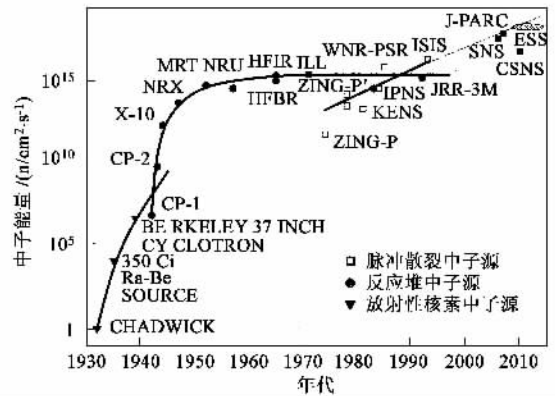


图3 不同种类中子源的中子通量随年代的发展变化<sup>[1]</sup>

散裂中子源是由加速器加速到GeV能量的质子轰击重金属靶而产生中子的大科学装置.通过原子的核内级联和核外级联等复杂的核反应(图4),每个高能质子能产生20—40个中子,每产生一个中子释放的热量仅为反应堆的约四分之一( $\sim 45\text{MeV}$ ).

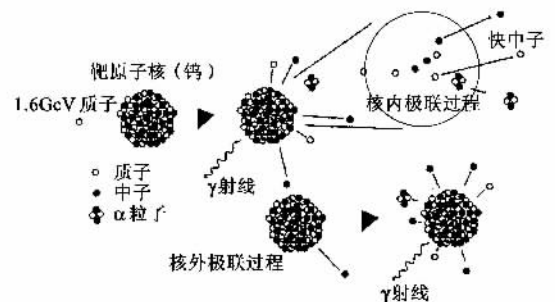


图4 高能质子轰击重金属原子散裂出中子的原理示意图

表1 目前世界上已运行、在建和计划筹建的脉冲式散裂中子源

	靶体材料	脉冲频率	质子能量	质子束功率	脉冲中子通量	运行时间
KENS( KEK ,日本)	W/Ta	50 Hz	0.5 GeV	3 kW		1980
IPNS( ANL ,美国)	U	60 Hz	0.5 GeV	6 kW		1981
LANSCE( LANL ,美国)	W/Ta	60 Hz	0.8 GeV	80 kW		1985
ISIS( RAL ,英国)	W/Ta	50 Hz	0.8 GeV	160 kW	$8 \times 10^{15}/\text{cm}^2/\text{s}$	1985
SNS( ORNL ,美国)	Hg	60 Hz	1.0 GeV	1.4 MW	$1 \times 10^{17}/\text{cm}^2/\text{s}$	2006
JSNS( 日本)	Hg	25 Hz	3.0 GeV	1.0 MW	$1.2 \times 10^{17}/\text{cm}^2/\text{s}$	2007
ESS( 欧盟)	Hg	50 Hz	1.0 GeV	5.0 MW		未知
CSNS( 中国)	W/Ta	25 Hz	1.6 GeV	100 kW	$2.5 \times 10^{16}/\text{cm}^2/\text{s}$	2010( 预计)

目前世界上运行的脉冲式散裂中子源主要有日本的 KENS ,美国的 IPNS 和 LANSCE ,英国的 ISIS ; 在建和计划筹建的有美国的 SNS ,日本的 JSNS ,欧盟的 ESS 和中国的 CSNS 等. 它们的主要特征指标见表 1. 功率在 100kW 以上的散裂中子源其脉冲中子通量高出反应堆的中子通量 1—2 个数量级. 目前世界上最亮的散裂源——英国卢瑟福实验室的散裂脉冲中子源 ISIS——利用直线加速器将质子加速到 70 MeV ,接着用同步回旋加速器使质子加速到 800MeV ,然后轰击钨靶 ,产生的脉冲中子通量为  $8 \times 10^{15} \text{ n/cm}^2/\text{s}$ . 尽管其时间平均通量低于反应堆 2—3 个数量级 ,但是对于中子散射来说 ,散裂中子源的脉冲特性使人们可方便地采用飞行时间技术去利用某一波段范围内的全部中子 ,而不像反应堆那样通常只选取某一特定波长的中子 ,因此 ,中子的使用效率可提高 1—3 个量级. 散裂中子的脉冲特性还带来另外两个好处 :一是由于脉冲之间没有中子产生 ,使中子散射的本底很低 ,提高了采集信号的信噪比 ;二是散射装置都可以固定 ,没有反应堆谱仪的复杂的机械转动 ,几乎可在近似  $4\pi$  的立体角范围内安装探测器 ,进一步提高了中子的利用率. 图 5 比较了当今世界公认最好的反应堆 ILL 与散裂源 ISIS 中子通量<sup>[1]</sup>. 与热功率 58MW 的反应堆 ILL 相比 ,核( 质子束 )功率 160kW 的 ISIS 的 25K 液氢慢化器( 用于使快中子慢化的装置称为慢化器 )时间平均的绝对中子通量约小 3 个数量级. 但有效利用的中子通量要高出 3 个数量级. 中子散射实验时 ,ISIS 实际使用的有效中子通量除热中子区域略小外 ,其余的超热中子、冷中子的有效通量都高于 ILL ,尤其是超热中子. 采用先进的靶体设计 ,我国的 CSNS 在 100kW 核功率下的脉冲中子通量将可达  $2.4 \times 10^{16} \text{ n/cm}^2/\text{s}$  ,为 ISIS 的三倍 ,并预留升级的空间<sup>[6,7]</sup>. 散裂中子源高的有效中子通量和信噪比为毫克量级小

样品的中子散射研究提供了可能.

通常散裂中子源由质子加速器、产生中子的靶站和中子散射谱仪等三部分组成. 质子加速器相对复杂 ,并与中子散射没有直接的联系 ,将另文介绍. 下面将分别介绍产生中子的靶站和中子散射谱仪.

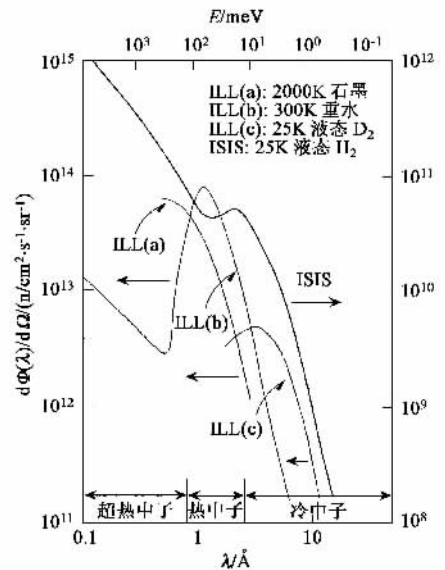


图5 当今世界中子散射用中子通量最高的反应堆中子源 ILL 和散裂中子源 ISIS 的中子通量对比. ISIS 的时间平均通量低于 ILL( 脉冲中子通量高出 ILL 反应堆 50 余倍 ) ,但飞行时间技术和探测器阵列使中子散射的中子有效利用率高出 3 个量级<sup>[1]</sup>

### 3.1 散裂中子源靶站

靶站是产生中子的核心装置 ,通常是由重金属靶、慢化器、反射体、冷却系统和生物屏蔽体等部分组成 ,如图 6 所示. 与质子加速器的界面是由水冷却的高强度不锈钢构成的质子束窗. 经加速器加速的高能质子束穿过此窗进入重金属靶 ,与重金属原子的原子核碰撞. 通过核内级联和核外级联等复杂的

核反应,重原子核散裂出包括中子在内的多种高能粒子.图7所示为不同靶体材料中,每个入射质子产生中子的个数与入射质子能量的关系.每个1.5 GeV高能质子能产生20—40个中子<sup>[5]</sup>.作为产生中子的关键部件,除要求其中子产额高外,重金属靶还必须有良好的导热、抗腐蚀和抗辐射损伤等性能,同时还尽可能避免产生半衰期同位素,以保证装置稳定、高效、长期地安全运行.当前公认的看法(尽管对具体分界还存在争议)是:质子束功率在1MW以下时,重水冷却的固态靶比较合适,但当束功率超过1MW时,则需使用液态靶.一般地说,固态靶材选用外层包裹薄钽层的钨,液态靶材则选用汞或铅铋合金.

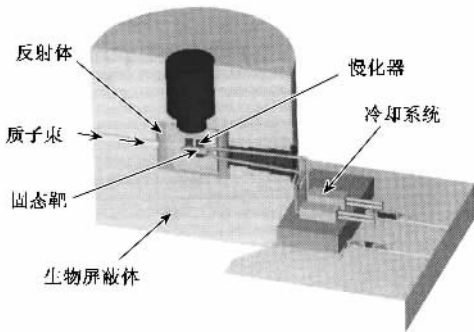


图6 散裂中子源靶站结构示意图

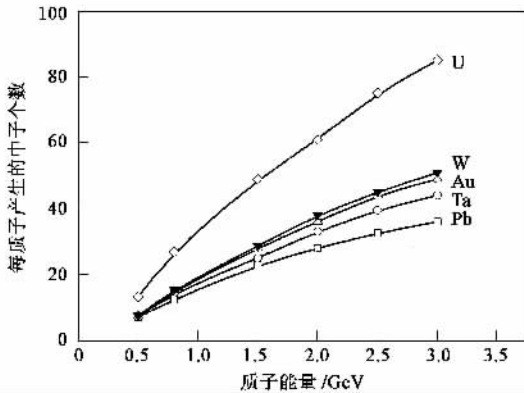


图7 不同重金属材料产生的中子数与入射质子能量的关系

通过散裂反应产生的中子,通常能量很高,速度很快.在用于中子散射实验之前,需要让它减速慢下来,这一过程称为慢化.慢化器包括慢化工质、工质容器和冷却系统.尽管慢化工质也可使用其他固态材料,但是液态材料具有温度均匀且容易稳定、没有明显的辐射损伤和具有连续的原子分子振动态密度等优点.因此,慢化工质通常选用含氢密度高的液态材料,如水、液态甲烷、液氢等.氢原子的质量与中子

一致,且有相当大的非相干散射,中子与慢化工质中的氢原子多次碰撞后,能量迅速转移至慢化工质,自身速度迅速降低.而转移至慢化工质的能量,以热的方式被冷却系统带出.

既然中子慢化是通过多次碰撞实现,不同能量(波长)中子的脉冲形状就不尽相同.能量越低(波长越长),需要的碰撞次数越多,脉冲的时间分布就越宽.而慢化后中子的时间分布特性是决定飞行时间谱仪分辨率的关键因素.因此,一个理想的慢化器必须具有高的中子通量和窄的脉冲宽度.事实上,这两者是相互矛盾的.厚的慢化器可得到高中子通量,但是脉冲却被大大地展宽.设计慢化器时,首先必须考虑相应的中子散射实验所需要的分辨率,然后再优化其中子通量.要尽可能满足上述要求,通常还需要反射体、退耦合体(decoupler)和慢化器内低能中子吸收体(poisoner)等(见图8)的配合.

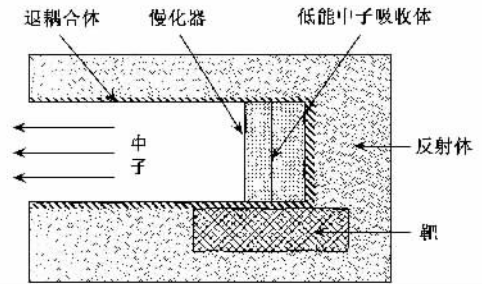


图8 靶站内中子慢化体系示意图

反射体是能把从靶体或慢化器中逃逸出来的部分中子再折回慢化器的装置,它可进一步提高样品处的中子通量.同时逃逸出来的高能质子和快中子还分别通过散裂和(n,2n)反应在反射体中产生中子.反射体一般使用Be/Fe复合体.除质子束和中子孔道外,Be紧紧围绕核心的靶体和慢化器,外围再被Fe所包围.它能增加近30%的中子通量.当谱仪要求高中子通量和低分辨率时,通常采用耦合的、没有低能吸收的慢化器,如小角散射、中子反射等.当需要很高的分辨率时,通常采用有退耦合体和低能吸收体的慢化器,以保持较好的脉冲宽度,如高分辨粉末衍射、高能分辨的分子动态谱仪等.退耦合体一般使用镉、B<sub>4</sub>C及它的复合材料如(B<sub>4</sub>C + Ag)等,而慢化器内低能中子吸收体一般使用高吸收率的金属Gd.

CSNS靶站<sup>[6,7]</sup>将采用重水冷却多片钨靶(高40 × 宽100 × 厚10mm × 40片),铍/铁反射体(铍φ1200 × 1000mm,铁φ<sub>in</sub>1200 - φ<sub>out</sub>2000mm),铁/重

混凝土生物屏蔽体(  $\phi_{in} 2000 - \phi_{out} 10000\text{mm}$  )组成. 三个 WING 型慢化器:水( 300K,退耦合),液态甲烷( 100 K,退耦合加低能电子吸收)和液态氢( 20 K,耦合). 前两个慢化器一前一后地放在钨靶上方,而液氢慢化器放在钨靶下方. 铁/重混凝土生物屏蔽体内设有 18 个水平中子孔道,每个慢化器面对 6 个中子孔道(慢化器的前后表面各有 3 个中子孔道). 使用 NMTC/JAM<sup>[9]</sup> 模拟了该设计的扁靶溢出的脉冲中子通量. 结果表明<sup>[10]</sup> 脉冲中子通量为  $2.4 \times 10^{16} \text{ n/cm}^2/\text{s}$  (质子能量为 1.6 GeV,束功率为 100kW,脉冲频率为 25Hz),是 ISIS 的 3 倍(质子能量为 800MeV,束功率为 160kW,脉冲频率为 50Hz). 依据上述 CSNS 靶体和水冷系统的设计,使用 IDEAS - TMG 商用热分析软件包模拟了冷却水流速度和靶体内最高温度的关系<sup>[6]</sup>. 在 100kW 核功率下,靶体内总发热量为 47 kJ/s. 温度为 20℃ 的冷却水以 2m/s 的速度流过多片靶凸棱构成的空隙时,其温度最高升至 90℃ 附近,而靶体最大应变仅 0.2 mm.

### 3.2 中子散射谱仪

中子散射谱仪按其探测中子物理量的变化可分为两类:弹性散射谱仪和非弹性散射谱仪. 弹性散射谱仪所探测的散射中子仅在空间分布上产生了变化,而能量仍与入射中子一致,主要研究物质中原子、分子等的位置,即结构信息. 非弹性散射谱仪不仅探测散射中子在空间分布上的变化,而且还同时探测散射中子的能量变化,主要研究物质中原子、分子等是如何运动的,即动力学过程. 根据不同的研究对象和研究目的,散裂中子源常见的中子散射谱仪可大致分为以下 6 种类型<sup>[8]</sup>:粉末衍射仪、单晶衍射仪、小角衍射仪、反射仪、直接几何非弹性散射谱仪(转子谱仪)和逆几何非弹性散射谱仪(晶体分析器谱仪). 前四种是弹性散射谱仪,后两种是非弹性散射谱仪. 同时还有如背散射谱仪、自旋回波谱仪、中子康普顿散射谱仪等技术相对复杂、使用率相对偏低的非弹性散射谱仪.

散裂中子源的中子散射谱仪大部分都采用飞行时间技术,即以中子从慢化器飞行到达探测器所用时间来区分中子能量(波长)的一种方法. 中子能量  $E$ 、波长  $\lambda$  和飞行时间  $t$  的关系可表述为:

$$E = h^2 / (2m\lambda^2), \lambda = ht / (mL),$$

其中  $m$ 、 $L$  分别为中子的质量和飞行距离. 中子飞行时间谱仪的基本几何结构如图 9 所示:来自慢化器的中子,经中子导管,飞过第一飞行距离  $L_0$ ,入射到

样品上,与样品相互作用被散射出来,经过第二飞行距离  $L_1$ ,进入探测器被记录下来. 在中子束入射样品的第一飞行距离内,通常在距慢化器 4—6m 处,放置斩波器  $T_0$ ,通常称为本底转子. 其转动周期与质子束的脉冲周期相同,主要用于阻挡在前后两中子脉冲之间杂散的高能粒子,进一步降低本底,提高信噪比. 在距慢化器 10m 或更远处安置另一斩波器  $T_1$ ,以选取散射实验中所使用的中子波长范围,通常称为波长(或能量)选择转子. 根据样品距慢化器的远近和实验所要求的精度,在  $T_1$  和样品之间还可安置更多的波长选择转子. 中子入射样品前,需要一中子通量监视器,以实时监测每一脉冲中入射样品的不同波长的中子通量,为散射数据归一处理提供依据. 经样品散射的中子,被围绕样品周围的探测器记录,成为散射数据.

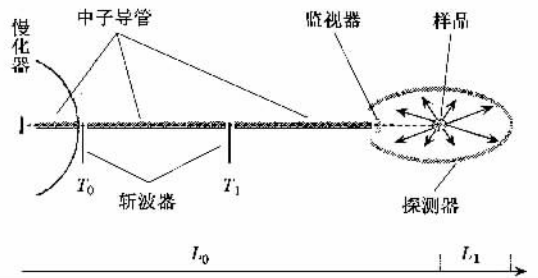


图9 中子飞行时间谱仪结构示意图

任何一台谱仪的应用范围不可能是无限的. 每一类谱仪都会因其不同的用途而分成若干种. 例如粉末衍射仪中有高通量粉末衍射仪、高分辨粉末衍射仪、工程用粉末衍射仪等等. 当前谱仪最多的散裂中子源 ISIS 拥有 18 台中子散射谱仪,其中 7 台为粉末衍射仪<sup>[11]</sup>.

下面扼要介绍常见的六类散裂中子源谱仪的特点和它的多学科应用.

#### 3.2.1 中子粉末衍射仪

中子粉末衍射仪是使用最广泛、用户量最大的谱仪,主要用于研究物质的晶体结构和磁结构. 小角度探测器适于测定较大分子的结构,背反射探测器适于分辨率较高的研究,散射角度  $2\theta = 90^\circ$  处的探测器可有效地避免样品容器的散射,适于特殊样品环境下的结构研究.

根据一般的谱仪设计要求估计,飞行时间衍射谱仪的样品位置与分辨率关系可近似表达为<sup>[5,8]</sup>:

$$L_{\text{match}} = \sqrt{3}\delta_m / R \approx 48/R (\text{mm}).$$

要达到 0.1% 的分辨率,需要样品大致离开散裂中子源约 50m 左右.中子飞行距离增加虽然能有效地提高谱仪的分辨率,但同时降低了中子的通量.

粉末衍射谱仪将主要应用于 (1) 结构确定; (2) 实时反应 (3) 磁结构研究 (4) 相变研究 (5) 材料中的微结构、织构及应力等工程应用.

### 3.2.2 中子单晶衍射仪

脉冲中子和连续中子束都能对单晶产生劳厄像.对连续中子而言,反射( $h\ k\ l$ )与( $nh\ nk\ nl$ )的劳厄斑点是相互重叠的.相反地,采用脉冲中子的飞行时间技术,它们则可以被分开,以精确的测量每个衍射峰的积分强度.因此,散裂中子源单晶衍射仪均采用飞行时间劳厄技术,利用二维探测器,可对倒易空间进行立体的三维取样.固定在测角头上的单晶,其倒易点阵只要落入探测器可探测的倒易空间范围之内,就会在二维探测器上形成劳厄像.测角头可改变单晶的取向,以测量不同的倒易空间的衍射数据.

散裂中子源单晶衍射仪的劳厄像不仅能记录布拉格衍射,同时也能记录布拉格衍射之间的倒易空间的信息,极有利于研究超晶格以及非公度相.谱仪主要应用领域为 (1) 含氢化合物或过渡族金属络合物等的结构 (2) 利用单晶研究复杂磁结构 (3) 精确测量磁形状因子 (4) 非公度调制和相变.

### 3.2.3 中子小角散射仪

小角散射是小角度范围内的弹性散射,是空间尺度在  $10-10^4\text{\AA}$  范围内的原子分子团簇结构分析的有效工具.散射矢量  $Q$  与散射角  $2\theta$  和中子波长  $\lambda$  之间的关系为:  $Q = 4\pi\sin\theta/\lambda$ .为了研究  $10-10^4\text{\AA}$  范围内的结构,必须测量散射矢量  $Q$  在  $10^{-4}-10^{-1}\text{\AA}^{-1}$  范围内的散射数据,即小角散射数据.小角散射数据中包含的主要信息为散射团簇的颗粒形状和大小,以及颗粒中某些特定成分的位置.散裂中子源上的小角散射仪利用脉冲中子进行波长扫描,一次性测量能得到很宽的  $Q$  范围.

小角散射谱仪主要应用于 (1) 凝胶溶胶,表面活性剂 (2) 聚合物 (3) 大分子体系 (4) 膜结构; (5) 生物囊泡结构 (6) 药物传送 (7) 微孔体系; (8) 磁畴和成分调制.

### 3.2.4 中子反射仪

中子反射仪用于研究物质表面和界面的结构特性,是中子散射谱仪中最年轻的成员.未考虑吸收引

起的复数项时,中子折射率为  $n = 1 - b(\lambda^2 N/2\pi)$ .一般地,空气折射率为 1,其他介质的折射率小于 1.因  $(1-n)$  在  $10^{-6}$  量级,发生全反射的临界角很小.单质  $^{58}\text{Ni}$  的临界角最大,也仅为  $0.1145^\circ/\text{\AA}$ .因此,实验中需要准直性很好的长波中子.对于磁性材料的表面和界面,折射率中还有与磁相互作用有关的一项:  $\pm c\mu(\lambda^2 N/2\pi)$ ,  $\pm$  号取决于中子自旋方向与表面上外加磁场的方向平行或反平行.如果磁场垂直于表面,则无此项.如果  $c\mu = b$ ,反射中子将被极化.

同样,使用二维探测器既能探测镜面反射,又能探测非镜面散射.镜面反射包含了垂直于膜面方向上的结构信息.非镜面散射则起源于膜面内的结构涨落,如磁畴以及粗糙的层间界面等.主要应用领域包括 (1) 液晶取向 (2) 表面吸附 (3) 固液界面; (4) 聚合物及 LB 膜 (5) 界面现象 (6) 低维结构; (7) 表面磁性.

### 3.2.5 直接几何非弹性中子散射仪

直接几何非弹性中子散射仪的结构原理如图 10(a) 所示.费米转子从每个脉冲中挑选出波矢为  $Q_0$ 、能量为  $E_0$  的单色中子.经样品散射后,被散射角为  $2\theta$  的方向上的探测器接收.探测器在记录散射中子数目的同时,也记下了该中子的总飞行时间.因此,由探测器安置的角度和到达该探测器中子的时间,可计算出散射中子的波矢  $Q_1$  和能量  $E_1$ .从而计算出研究对象中准粒子态激发的动量和能量.

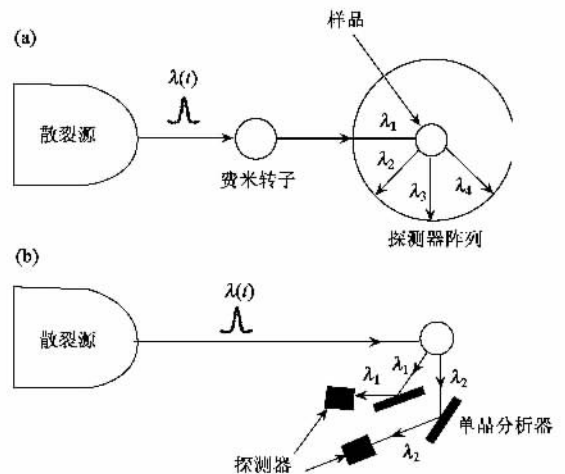


图 10 直接几何 (a) 和逆几何 (b) 非弹性中子散射仪原理示意图

通过调整费米转子的转速,使谱仪能量覆盖范围可从几个毫电子伏特到上千毫电子伏特.大量的位置灵敏探测器,可以一次性测量单晶样品的散射

函数  $S(Q, E)$  或多晶样品的态密度散射函数  $S(E)$ . 谱仪主要用于测量 (1) 单晶或粉末材料中的晶格振动和自旋波 (2) 单晶或粉末材料中的原子、分子及磁矩的短程关联 (3) 非色散激发 (4) 布里渊散射.

### 3.2.6 逆几何非弹性中子散射仪

逆几何非弹性中子散射仪的结构原理如图 10 (b) 所示. 正好与直接几何非弹性谱仪相反, 其入射脉冲中子为白光. 散射角为  $2\theta$  的散射中子经单晶分析器衍射后被单色化, 其能量  $E_1$  由单晶分析器反射面的晶面间距和入射角决定. 由探测器记录下中子的总飞行时间, 可以计算出入射中子的能量和动量, 从而得出样品中某动态过程的激发、色散关系或态密度等.

逆几何非弹性中子散射仪效率较高, 可用于较小样品以及不太稳定的样品的研究. 适于分子谱的研究. 主要应用领域包括 (1) 缺陷等的准弹性散射 (2) 分子转动和平移扩散 (3) 隧道谱学 (4) 聚合物体系相变 (5) 蛋白质折叠.

根据我国用户的要求和建议, CSNS 计划第一期设计建造高通量粉末衍射、高分辨粉末衍射、宽  $Q$  值小角散射、多功能反射和直接几何非弹性等五台典型的中子散射谱仪, 以覆盖大部分的中子散射研究领域. 高通量粉末衍射仪和高分辨粉末衍射仪将从内置低能中子吸收体的退耦合液态甲烷慢化器中取出通量高、脉冲时间窄的中子, 以满足高通量和高分辨率的要求. 最小的样品体积、最短的测量时间和最高的分辨率  $\Delta d/d$  分别为  $1\text{mm}^3$ 、1—2 分钟和 0.05%. 小角散射仪和多功能反射仪的分辨率要求不高 ( $\Delta Q/Q = 5\% - 10\%$ ), 但需要高通量的长波中子, 因此选择耦合的液氢慢化器. 而直接几何非弹性散射仪则要求适中的分辨率 (能量分辨率约为 5%), 宽的能量分布和相对高的高能中子通量, 退耦合的室温水慢化器是其合适的选择.

## 4 结束语

具有有效中子通量、无强放射性核废料等特征的散裂中子源, 集中了 20 世纪物理学的三大科技领域——加速器物理、中子物理和中子散射——的成果. 作为一种多学科应用的大型科研平台, 将在很多基础学科如凝聚态物理、化学、生物工程、材料科学、核物理、核医学、核化学等领域的研究中被广泛采用. 发达国家正把建设高性能散裂中子源作为提高科技创新能力的重要措施. 相对反应堆中子源来说, 散裂中子源各项技术更复杂, 也正在发展, 还不十分成熟. 技术上的挑战, 也正是我们的机遇. 抓住这一机遇, 可使我国质子加速器、中子科学、凝聚态物理和化学、材料科学及生命科学等领域的研究和开发水平得到大幅度的提升.

### 参 考 文 献

- [ 1 ] Sköld K, Price D L. *Methods of Experimental Physics*, Vol. 23: Neutron Scattering. INC. London: Academic Press, 1988
- [ 2 ] Bacon G E. *Neutron Diffraction* (3rd). Oxford: Clarendon Press, 1975
- [ 3 ] Shull C G, Morton G, Davidson W L. *Phys. Rev.*, 1948, 73: 842
- [ 4 ] Brockhouse B N. *Phys. Rev.*, 1955, 99: 601
- [ 5 ] Windsor C G. *Pulsed Neutron Scattering*. London: Taylor & Francis LTD, 1981
- [ 6 ] 中国科学院散裂中子源概念设计组. 多学科应用平台散裂中子源的关键技术创新研究报告. 2004 [ Group of Conceptual Design for Chinese Spallation Neutron Source. Chinese Academy of Sciences, Report on Creative Studies of Key Techniques for Multi-disciplinary Spallation Neutron Source. 2004 (in Chinese) ]
- [ 7 ] Zhang J *et al.* *J. Neutron Research*, 2005, 13: 11
- [ 8 ] Newport R J, Rainford B D, Cywinski R. *Neutron Scattering at a Pulsed Source*. Bristol: J W Arrowsmith Ltd, 1988
- [ 9 ] Koji N *et al.* *High Energy Particle Transport Code NMTC/JAM*. Tokai-mura: Japan Atomic Energy Research Institute, 2001
- [ 10 ] Yin W, Zhang G F, Du J H, Liang J Q. *Chin. Phys.*, 2003 (12): 559
- [ 11 ] <http://www.isis.rl.ac.uk/instruments/index.htm>