

高性能單晶分光儀X光光束線

馬建毅、張劍虹、陳政祺、黃良仁、馮學深
鍾世俊、曾金榮(光束線組)

爲了蛋白質結晶學之研究，本中心於2004年初裝設了超導增頻磁鐵SW6(superconducting wiggler with 6 cm period)以提供達20 keV之高強度硬X光。SW6的輸出光源爲三條光束線所充分利用，其中一條光束線BL13B配備雙晶分光儀(double crystal monochromator, DCM)，使用光源的中心部份，涵蓋6.5 keV至19 keV之X光。另兩條光束線BL13A與BL13C配備非對稱切割曲面晶體分光儀(asymmetric-cut curved crystal monochromator, ACCM)，使用光源水平方向之兩側部份。BL13A與BL13C利用特殊設計之ACCM分光儀提供12 keV至14 keV之X光。此分光儀並使用新的冷卻設計，可在高通量光與高解析度下保持極佳穩定度。此二條光束線之設計將爲本文所討論的主題。

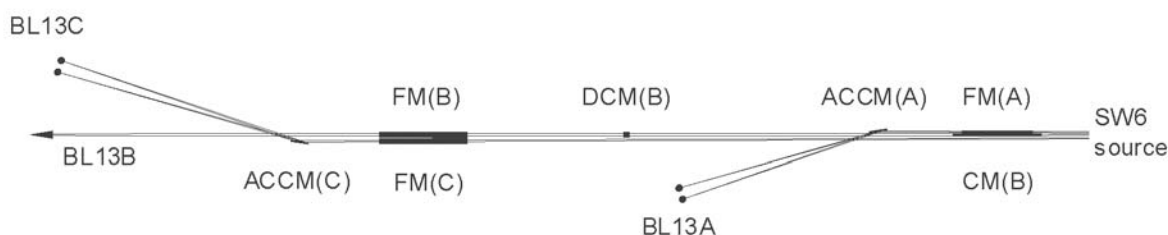
光束線設計

BL13A、BL13B、BL13C光束線之光學配置圖如圖一所示。其中BL13A與BL13C是位於BL13B兩側的分支光束線，接受SW6輸出光源的兩側部份，故所對應的有效光源尺寸較接收中心部份的BL13B爲大。爲減低此效應，通常在設計此類分支光束線時，盡量將其靠近光源之中心線。經過對光學元件的佈局與空間使用的最佳化考量後，我們將BL13A的中心線定於

距離SW6輸出水平中心3 mrad處，而BL13C位於4 mrad處。此二支線個別收取水平方向1 mrad的光源，而中心線BL13B使用2 mrad的光源。

圖一所示的BL13A與BL13C光束線的第一個光學元件都是採用鍍Rh的Si基材之垂直聚焦鏡，第二個光學元件是曲面Si(111)單晶分光儀，同時具備水平聚焦功能。在BL13A中，光束先由垂直聚焦鏡FM(A)聚焦並向下反射，然後進入ACCM(A)，在ACCM(A)中通過BL13B光束的下方，並向側面反射進入實驗站。在BL13C中，光束先由垂直聚焦鏡FM(C)聚焦並向上反射，然後進入ACCM(C)，在ACCM(C)中通過BL13B光束的下方，並向側面反射進入實驗站。圖一內由ACCM指向實驗站樣品位置的兩條線表示12 keV與14 keV的光束。在12 keV至14 keV範圍內，BL13A與BL13C將可爲單光結晶學實驗提供 1×10^{11} photons/sec之光通量與 1.5×10^{-3} 之解析度($\Delta E/E$)。

此光束線可涵蓋12 keV至14 keV的能量，爲簡化調整能量的機制，我們將鍍Rh的聚焦鏡設置於分光儀的上游，故而調整分光儀晶體的Bragg角度來設定輸出能量時，不須改變聚焦鏡之設定。又因選定適當的入射角，使Rh聚焦鏡僅反射能量小於約15 keV的光子，故分光儀晶



圖一 SW6超導增頻磁鐵光束線BL13A、BL13B、BL13C之光學配置上視圖

體的熱負載得以減小。

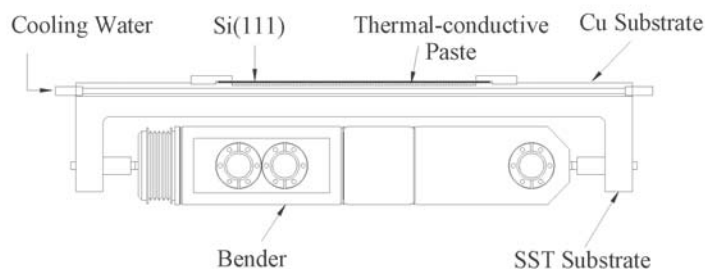
基本上此種分支光束線之設計可將垂直聚焦鏡設置於分光儀之上游或下游，並且聚焦鏡反射面除金屬外亦可使用其他材料。例如此類光束線經常採用多層膜作為聚焦鏡反射面，因在相同反射係數時，多層膜鏡面的入射角比金屬鍍膜鏡面為小，故可使用較小的鏡面尺寸以收取相同的光通量。多層膜是由高與低原子序的二種元素交替重疊形成，選取不同元素並對其厚度做個別調整，可形成類似於晶體的繞射效應，其輸出分布呈bandpass， $\Delta E/E$ 約在 10^{-1} 至 10^{-2} 。但因BL13A與BL13C未來的實驗包含Se與Br的k-edge吸收光譜，需涵蓋12 keV至14 keV的能量範圍，而多層膜的bandpass不足以包含此範圍，因此聚焦鏡的設計採用鍍Rh的反射面。

此Rh聚焦鏡的入射掠角為4.5 mrad，BL13A的聚焦比率為2.9，BL13C為4.1。在此入射角下，雖然在入射方向的鏡面尺寸會比同等的多層膜鏡面為大，但仍在1 m的合理範圍內，故相對於使用多層膜鏡面的設計而言，並未損失任何光通量。如前所述，將Rh聚焦鏡置於分光儀的上游有簡化調整能量機制的優點，故此光束線於調整能量時，僅需將分光儀的Bragg角以及實驗站同時依於分光儀的轉動軸做調整，而無須調整Rh聚焦鏡。入射掠角設定於4.5 mrad的目是為了衰減15 keV以上的光子通量，並可使分光儀的熱負載減少。此Rh聚焦鏡為Be窗之後的第一個光學元件，須承受約35 W的熱量，此熱負載可由鏡子兩側的水冷銅塊帶走。

分光儀設計

曲面晶體分光儀是X光光束線經常使用的設計，因其結構簡單且具有良好能量解析度與聚焦特性^[1,2]。此類光束線通常由一個曲面單晶分光儀與一個垂直聚焦鏡組成，而分光儀的繞射晶體由一片曲面單晶組成，並同時作為水平

聚焦之用^[3]。因光束經過曲面單晶後向側面轉向，故對於空間受限的分支光束線而言是很理想的設計。這類光束線與DCM光束線之不同處，在於不易做連續的能量掃描，但仍可經由轉動單晶的入射角以達到調整能量的功能。



圖二 單晶分光儀之冷卻系統與曲率調整機制之示意圖

BL13A與BL13C光束線的分光儀採用Si(111)非對稱切割單晶，並固定在可改變其曲率半徑的一組bender之上，如圖二所示。使用非對稱切割單晶可使曲面晶體繞射時仍保持良好聚焦條件以及能量解析度^[4]。此分光儀的設計參數列於表一。因分支光束線所接收的光源尺寸於水平方向較大，故將BL13C水平聚焦比率定為6.6，BL13A定為5.3，以減小聚焦點在水平方向的尺寸。如前所述，此分光儀可調能量為12 keV至14 keV，為了在此範圍內保持最佳聚焦條件，BL13C單晶的曲率半徑在60 m至80 m範圍內可調，亦即對應每一能量設定，調整機制皆可將單晶的曲率調至最佳值。圖二所示的晶體調整與冷卻機制，裝置於一組goniometer系統上，以作為旋轉晶體與幾何定位之用。

此晶體的熱負載比位於其上游的Rh聚焦鏡為高，約在100 W，因此需要適當的冷卻系統以防止晶體變形而影響性能。設計此系統的關鍵在於須整合冷卻系統與曲率調整機制於一體，並維持合理的體積與重量來配合goniometer系統，保持調整機制之精確度。目前世界上已有之設計包括晶體內建水道的冷卻方式，但成本較高且結構較脆弱，其中冷卻水的壓力亦會影響晶體表面之平整度。其他利用液體合金冷卻的方式，通常無法將冷卻液佈滿晶體背面，

表一 分光儀之設計參數

	BL13A	BL13C
Shape	Tangential Cylinder	
Bragg Angle (12/13/14 keV)	9.483° / 8.748° / 8.118°	
Asymmetric-cut Angle	5.976°	6.478°
Radius of Curvature (12/13/14 keV)	42 m / 48 m / 57 m	60 m / 72 m / 82 m
Source to Crystal Distance	12.35 m	18.90 m
Crystal to Object Distance	2.35 m	2.85 m
Beam Footprint on Crystal (H × V)	50 mm × 2 mm	84 mm × 3 mm
Beam Size on Sample (H × V)	200 μm × 100 μm	200 μm × 100 μm

或是與晶體受熱面有一段距離而導熱不良，其效果均不甚理想。為此我們設計了一個成本合理且有效的冷卻系統及調整機制，如圖二所示。其中非對稱切割的單晶製作成片狀，其兩端固定於一個銅製的基材上。位於單晶下方的銅挖成一淺槽，故單晶與銅基材僅於晶體兩端固定位置才有直接的接觸。單晶的背面與淺槽之間的空間是以一種特別的膏狀金屬混合物所填滿，此膏狀物由 Ga、In 以及其他金屬粉末所製成，具有良好的導熱性，並且從室溫到 100 °C 都可保持黏稠狀，故能附著於晶片與銅基材之上而不至於流動。在銅基材中有冷卻水管，故晶片上的熱量可藉此導熱膏傳至銅基材而由冷卻水帶走。因導熱膏幾乎佈滿晶片背面所有面積，故熱量得以有效傳送到銅塊上。圖二中銅塊的下方是不鏽鋼製成的曲率調整機制，兩者由真空焊接結合。

結論

本文簡介了光束線組設計的 BL13A 與 BL13C X-ray 光束線，此光束線由一鍍 Rh 之垂直聚焦鏡與非對稱切割單晶分光儀所組成。藉由光學元件在有限空間內的適當配置，此光束

線可涵蓋 12 keV 至 14 keV 的能量範圍，並得以簡化能量調整機制。單晶分光儀配備了特殊設計的冷卻系統與曲率調整機制，其性能可超越目前已有之設計，以提供高解析度與高通量之光源。此二條光束線 BL13A 與 BL13C 預計於 2004 年秋天以前完成建造，並開始試車。最後感謝光束線組同仁對此計畫之協助。

參考文獻

- [1] Y. Cauchois and C. Bonnelle, "X-ray Diffraction Spectrometry" in *Atomic Inner Shell Processes*, Vol. II, edited by B. Crasemann, Academic Press, 83 (1975).
- [2] T. Matsushita and H. Hashizume, "X-ray Monochromators" in *Handbook on Synchrotron Radiation*, Vol. I, edited by E. E. Koch, North-Holland Publishing Company, 261 (1983).
- [3] M. Lemonnier, R. Fourme, F. Rousseaux, and R. Kahn, *Nucl. Instrum. Methods* **152**, 173 (1978).
- [4] M. Sanchez del Rio and F. Cerrina, *Rev. Sci. Instrum.* **63**, 936 (1992).