

BL07A X光散射／繞射光束線之概念設計

為了提供用戶更多的X光光源，以協助完成各項的實驗研究，本中心將於儲存環安裝三座超導增頻磁鐵插入元件X光光源。此三座新光源將應用於X光散射、繞射、小角散射及影像術等研究領域。本文介紹如何利用其中之一光源設計一座X光散射/繞射光束線。

曾平忠、張劍虹、徐嘉鴻、湯茂竹、曾金榮(光束線組、研究組)

為了解決同步輻射X光光源不敷使用的問題，本中心將於儲存環內三處位置對稱的偏轉磁鐵BM1與BM2之間加裝三座95公分長的能散段超導增頻磁鐵(In Achromatic Superconducting Wiggler, IASW)，提供更多的硬X光光源。IASW為磁場強度3.1 Tesla的超導電磁鐵插入元件，可提供光通量強度足夠使用的硬X光光源到能量25 keV。用戶經過多次的討論，決定利用此三個IASW光源建造三條光束線，BL07A、BL15A及BL23A，分別提供所需的光源給X光散射/繞射實驗(BL07A)、醫學影像術(BL15A)以及X光小角度散射(BL23A)等領域的科學研究使用。本文主要針對BL07A X光散射/繞射的實驗需求，進行光束線光學系統的概念設計及光束循跡模擬程式(ray tracing) SHADOW驗證，以了解BL07A光束線的光學性質，以及評估此光束線的預期功能。

設計參數

BL07A光束線可利用的光源參數以及所必需具備的功能簡列如下：

光源參數：

磁場強度 (magnetic field) ≥ 3.1 Tesla

磁極數目 (number of periods) = 13

磁場週期 (magnetic period) = 6 cm

光源大小(at 8 keV)：360 μ m \times 160 μ m

光源發散角度：9 mrad \times 0.35 mrad

光源水平扇形張角： ± 5 mrad

能量範圍：可用至 25 keV

光子通量 (photon flux)： 10^{12} - 10^{13}

(photons / 0.1%bw / mrad)

光束亮度 (beam brightness)： 10^{13} - 10^{14}

(photons / 0.1%BW / mm² / mrad²)

BL07A光束線的功能要求：

光束能量範圍：5 ~ 20 keV間，且必須能夠很簡易、快速的改變光束能量，且不影響光束品質。

光束能量解析度 $\Delta E/E$ ： $\leq 5 \times 10^{-4}$ 。

光束的聚焦大小： ≤ 0.3 mm \times 0.3 mm。

樣品的位置必須固定。

良好的使用環境：光束必須穩定、可靠，且須易於準直、調整及操作。

光束線之設計

BL07A光束線的設計採用最有利於X光散射或繞射實驗之光學設計模式。為了達到高亮度、高準直性以及高能量和散射向量(Q)解析度的要求，此光束線截取超導多極增頻磁鐵光源水平方向張角最中間2 mrad之主軸光束。此光束線的光學系統配置如圖一所示，主要的光學元件包括準直鏡(Collimating Mirror, CM)、非色散式的雙晶體單光器(Double Crystal Monochromator, DCM)^[1]與聚焦鏡(Focusing Mirror, FM)。為了充分利用光源，本光束線設有兩個實驗站D1與D2，可供散射與繞射等相關實驗。



圖一 BL07A X光散射／繞射光束線的光學系統配置圖。

超導多極增頻磁鐵光源產生的光束通過前端區濾光薄膜及鉍窗後，以水冷式限光器選取所要之光束。光束再經由距光源7公尺處的準直鏡將光束垂直方向的張角(divergence)消除，即盡可能將光源之光

表一 BL07A X光散射／繞射光束線光學元件設計參數

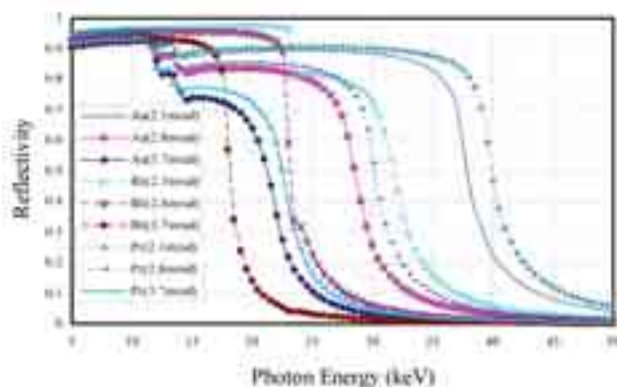
Optics	CM		Si(111) DCM	FM (Two separate mirrors)		FM (One bendable mirror)							
	Distance (m)	7	11.5	14		14							
Shape	Cylinder		Plane	Toroidal		Toroidal							
Size	100x10		10x10	100x10(cm)		100x10(cm)							
r1(m)	7(v)		11.5	14(h)/∞(v)		14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	14(h)/∞(v)	
r2(m)	∞(v)			7 (D1)	11 (D2)	7 (D1)	11 (D2)	7 (D1)	11 (D2)	7 (D1)	11 (D2)	7 (D1)	11 (D2)
θ_{glance} (mrad)	2.8			2.8	2.8	2.8	2.1	2.8	2.1	3.7	2.8	3.7	2.8
Coating	Rh	Pt		Rh	Rh	Rh	Rh	Pt	Pt	Rh	Rh	Pt	Pt
E_{cut} (keV)	23	30		23	23	23	30	30	40	18	23	22	30
Radius R(km) ρ (cm)	5.0 ∞		∞	5.0	7.86	5.0	10.38	5.0	10.38	3.79	7.86	3.79	7.86
Horizontal Acceptance Angle (mrad)	>5		>5	1.68	1.94	1.68	1.47	1.68	1.47	2.22	1.94	2.22	1.94

變成平行光，再由距光源11.5公尺處的非色散式Si(111)雙晶單光儀分光。此分光儀不但可以作快速能量掃描，提供高能量解析的光束，且維持出口光束穩定，保持樣品位置固定。分光後之光束再經由距光源14公尺處的聚焦鏡聚至兩個分別距光源21公尺(D1)及25公尺(D2)處的實驗站。D1實驗站的水平方向的聚焦比例(物距/像距)是2，故會有最佳的聚焦點^[2]，但D2實驗站的聚焦光束會有較小的發散角，各有優點，屆時可依實驗的需求選擇適合的實驗站。

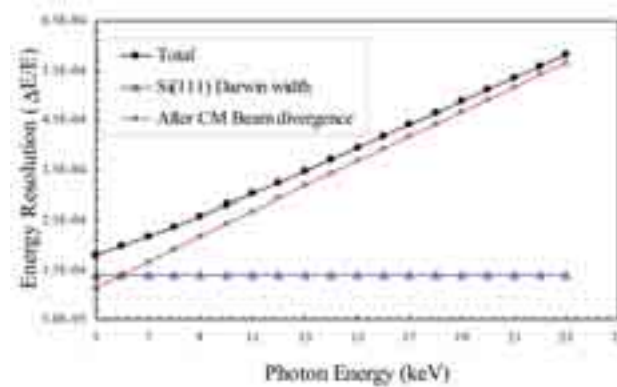
光束能量範圍之最佳化取決於光束的入射角度與光學鏡面材質的反射率。圖二顯示數種常用反射X光材質，金(Au)、白金(Pt)與銠(Rh)於不同入射鏡面的掠角之反射率。在同一入射角，鍍金或白金材質的鏡面可適用至較高的能量範圍，但他們的反射率在能量11 keV至14 keV之間有吸收結構，會影響高

精密光譜之量測，故一般除了有高能量範圍之需求外，大都較喜歡採用鍍銠之鏡面。

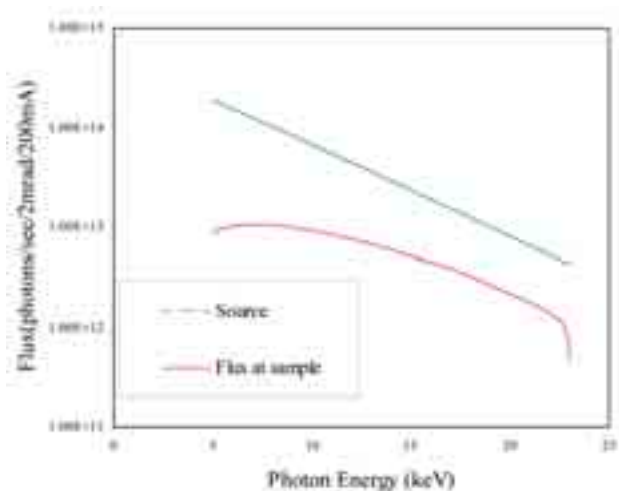
表一所示是BL07A X光散射／繞射光束線的光學元件設計參數，其中聚焦鏡可以採用二面曲率半徑不同之圓環型(toroidal)聚焦鏡或用一面可調曲率半徑之圓環型聚焦鏡，將光束分別聚到不同的實驗站，其中可調曲率半徑聚焦鏡亦有鍍銠或白金之選擇。若採用一面可調曲率之圓環型聚焦鏡，於所需之能量範圍，鍍銠鏡面有 ρ 值為2.61 cm或3.45 cm，而鍍白金者有 ρ 值為3.45 cm等選擇。若考慮所需之圓環型聚焦鏡的製作難易，則與水平方向聚焦相關的 ρ 值大者較容易製作，另者，若掠角入射角較大者，則圓環型聚焦鏡的光束水平可接收角會較大，可以收集較寬的光束，增加光通量。若採用二面曲率半徑不同之圓環型(toroidal)聚焦鏡，且以2.8 mrad為入射角，那D1實



圖二 最常用X光鏡面材質金(Au)、白金(Pt)與銠(Rh)於不同入射掠角的反射率。



圖三 BL07A X光散射／繞射光束線的能量解析度。



圖四 BL07A X光散射/繞射光束線的光源強度與樣品位置之光通量。

驗站由於使用 ρ 值為 2.61 cm 的圓環型聚焦鏡，所以水平方向只能接收 1.68 mrad 的光束。綜合上述考量，配合所需的能量範圍，建議採用一面 ρ 值為 3.45 cm 的可變曲率圓環型聚焦鏡，使用掠角入射角為 3.7 mrad 與 2.8 mrad，因其使用較大的 ρ 值，且有較大的光束水平接收角度。鏡面的鍍膜以銦為第一考量，白金為次要考慮。再者，使用一面可變曲率聚焦鏡可以省去一面聚焦鏡子的經費約 200 萬台幣。

預期功能

我們利用光束循跡模擬程式，估算光束聚焦點的尺寸、能量解析及光通量的大小。聚焦光束於樣品位置的大小平均約為 $0.3\text{ mm} \times 0.3\text{ mm}$ ，若需要較小的聚焦光點，可利用狹縫縮小光束的接收角度，但會損失光通量。決定光束能量解析度的主要因素有二：一是矽晶體本身固有的 X 光繞射道爾文寬度，另一是光束進入分光儀前的光束垂直張角（並非為零）。根據光束循跡程式模擬結果顯示，光束經過第一面圓柱型準直鏡後的光束垂直張角大約為 $2.5 \times 10^{-5}\text{ rad}$ ，此值大部分來自光源的尺寸所提供。將此值代入布拉格定律（Bragg's law），即可估算出對能量解析的影響。圖三表示 BL07A 光束線的能量解析度，其中清楚顯示，由於光源大小以及與分光儀距離的關係所決定的光束發散度主宰了這條光束線的能量解析度（ $\Delta E/E$ ），約介於 2×10^{-4} 到 5×10^{-4} 之間。此能量解析度可用減少光束的垂直接收角度來有效地提高，但如此將損失部分光通量。

利用光束循跡模擬程式，加上所用之濾光薄膜、

鈹窗（Be window）等的衰減常數，以及準直鏡、聚焦鏡的鏡面反射率等參數，估算出在實驗站的平均光束通量為大於 $5 \times 10^{12}\text{ Photons/sec/200 mA}$ ，如圖四所示。BL07A X 光散射/繞射光束線之概念設計已完成，此光束線預計於未來二到三年之內建造完成。此光束線的設計之所以能夠順利完成，要感謝光束線與材料小組所有同仁的協助，以及黃清鄉博士提供超導增頻磁鐵 IASW 的相關資料。

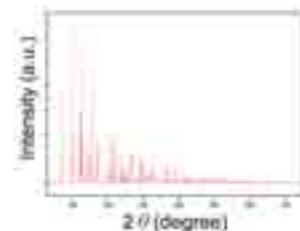
參考文獻

- [1] J. Feldhaus 242/SPIE Vol. 733 (1986).
- [2] T. E. Dann, *et al.*, SRRRC internal report SRRRC/RBM/IM/94-07 (1994).

科學小天地

（續第 22 頁）

本質上 X 光散射與繞射並不容易區別，不過兩者的應用卻有相當大的差異。自從布拉格（W. H. Bragg and W. L. Bragg）發現 X 光可以被晶體繞射，並據以求出晶體的原子排列，之後，X 光



X 光繞射干涉作用

繞射便成為結晶學研究最重要的技術。繞射的訊號通常比散射強上萬倍，實驗也相對好做。

現今繞射多用在結晶材料方面的研究，依樣品的種類或實驗的技術又區分為粉末繞射（powder diffraction）、單晶繞射（single crystal diffraction）、生物大分子結晶學（bio-macromolecular crystallography）等；至於散射則著重在不是三維規則排列的結構或特殊結構，例如研究薄膜或晶體表面結構的表面散射（surface scattering），探討磁性材料的磁散射（magnetic scattering）或是研究介於規則到完全不規則的構造的漫散射（diffuse scattering）。若是樣品之晶胞尺寸或顆粒大於數奈米到數十奈米，訊號出現在很低角度，就歸納在小角度散射（small angle X-ray scattering）或低角度繞射（low angle X-ray diffraction）的領域。本中心 01C、13A、13B、13C、15B、17A、17B 以及興建中的 IASW6 等光束線可以進行上述實驗。