BL07A X 光散射/繞射/吸收光譜光束線之設計

由數個大學的研究群所組成的大學聯合團隊(Associated Universities Team, AUT)計畫與中心同仁合作建造一條硬X光光束線，用來從事尖端X光散射、繞射及吸收光譜等實驗與量測，探討各種重要材料特性的研究。另外，此計畫也包含一系列新人的培訓，將有碩、博士研究生多人參與計畫並接受訓練，期望他們經此訓練成爲光束線使用和設計方面的專家，進而成爲同步輻射領域的新血輪。

前言

自中心提供數座同步輻射X光光源給用戶群使用以來，迄今已有效提昇國內許多研究團隊在基礎科學和應用科學研究方面的成效，而且其中還有爲數不少國際合作研究計畫正在進行當中，經過不斷努力現今在台灣的用戶群正在大幅成長，特別是硬X光用戶群成長最爲迅速。

最近材料科學和凝態物理出現許多令人興奮的新技術，例如自旋電子學和奈米科學等理論在工業技術上的應用所研發的技術，這些新技術在不久的將來會以超乎想像的廣泛運用在生活實物的設計上。在新科學和新技術的領域中，眾所皆知同步輻射的X光量測技術是許多重要實驗在材料特性和基礎原理探討的關鍵性利器，但現在中心硬X光光源顯然已無法滿足這些用戶群的需求。

爲了解決中心同步輻射硬X光光源不敷使用的問題，在1.5 GeV儲存環內之對稱的偏轉磁鐵BM1與BM2間，加裝三座95公分長的能散段超導增頻磁鐵（In-Achromatic Superconducting Wiggler， IASW），以此磁鐵所產生的光源有高通量及寬能帶等特性，提供了更多更先進的硬X光光源給相關的用戶們使用。IASW爲磁場強度3.1 Tesla 的超導電磁鐵插入元件，可供實驗的硬X光光源的範圍可達25 keV，而BL07A光源則是規劃給X光散射/繞射/吸收光譜等實驗的科學研究群使用。

我們將應用最先進的光束線設計使這條光束線在相空間中有 ~ 10 $Å^{-1}$的高空間解析度，而且在5 - 23 keV的範圍內有 ~ 100 meV的高能量解析度。實驗設備裝置上，樣品在高磁場(~12 T)及低溫(~2 K)的環境下能產生改變入射X光光束的極化性質的現象，預計進行的實驗有磁性薄膜、基材、奈米結構物質ˇ等材料，探討自旋電子物質在高磁場與低溫磁性相變化、複合式X光繞射(Multiple X-ray Diffraction)及X光激發的冷光效應方面的研究，此外也進行吸收光譜學方面的研究，以增加樣品在實驗測量上的多樣性。另外，每季將約有25 %的實驗時段開放給包含國際合作的一般實驗用戶使用。最後此計畫另一項重要的目標是在建造過程中訓練國內的碩、博士研究生，期望他們成爲光束線使用及設計方面的專家。

本文主要針對BL07A X光散射/繞射/吸收光譜實驗需求，進行光束線光學系統概念設計及光束循跡模擬程式（Ray Tracing）SHADOW中模擬驗證，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，並簡述已進行及預定進行的進度及時程之規畫。

光源參數

能散段超導增頻磁鐵（IASW6）安裝在1.5 GeV 電子儲存環內的偏轉磁鐵之間以提供強大的X 光光源，引出光源水平方向中央軸2 mrad的光，用來建造一條X光散射/繞射/吸收光譜實驗的光束線。在規畫的5-23 keV能量範圍區間，提供10^{13}-10^{14} photons/s/0.1%bw光子通量及10^{15}-10^{16}photons/s/0.1%bw/$mrad^2$/mm^2亮度， IASW插件磁鐵的設計參數及光源特性如下表：

磁場強度(Magnetic Field)：3.1 Tesla
磁極數目(Number of Periods)：14
磁場週期(Magnetic Period)：6.1 cm
偏向參數(Deflection Parameter) K=0.934Bλ：17.7
光源大小(at 15 keV)：0.37 mm × 0.16 mm
光源發散角度(at 15 keV)：6.86 mrad × 0.25 mrad
光源水平張角：±6 mrad〔68% of flux & 15 keV：±3 mrad〕
光通量(Photon Flux)@ 15 keV (0.4A)：4.7×10^{13} photons/0.1%bw/mrad
光束亮度(Beam Brightness)@ 15 keV (0.4A)：9×10^{15} photons/0.1%BW/mm^2/$mrad^2$
總功率@ 400 mA：2.7 kW

光束線之光學設計

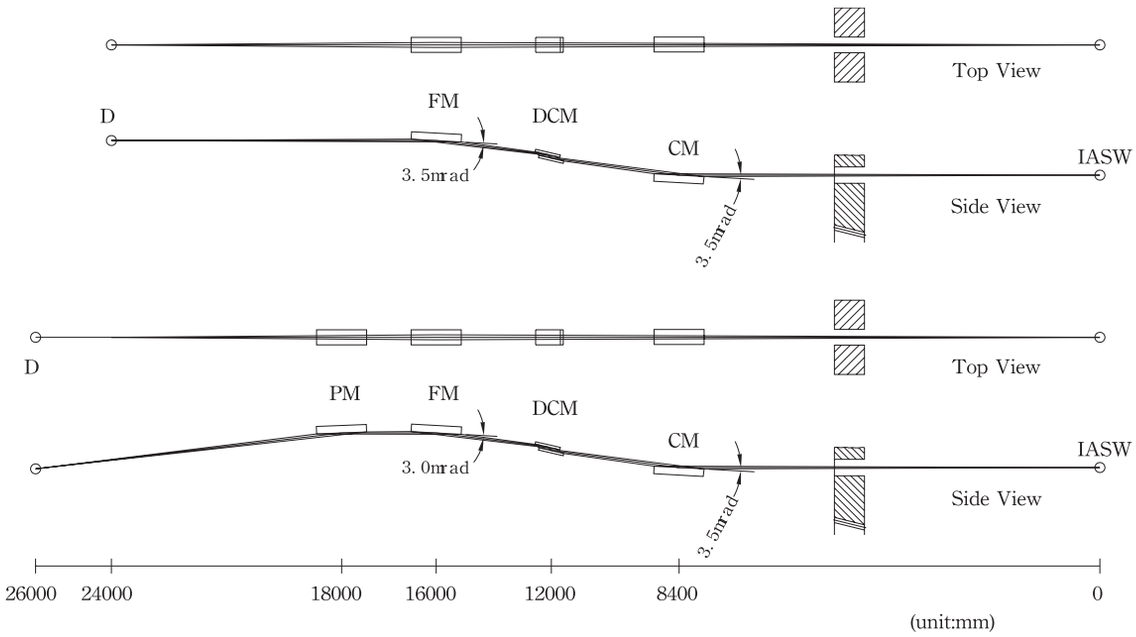
光源

BL07A光束線以X光散射或繞射實驗爲主，所以設計是採用最有利於X光散射或繞射實驗之光學設計模式，也就是讓最佳聚焦成像落在這個實驗站上。爲達到高亮度、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中央軸2 mrad 之主軸光束。

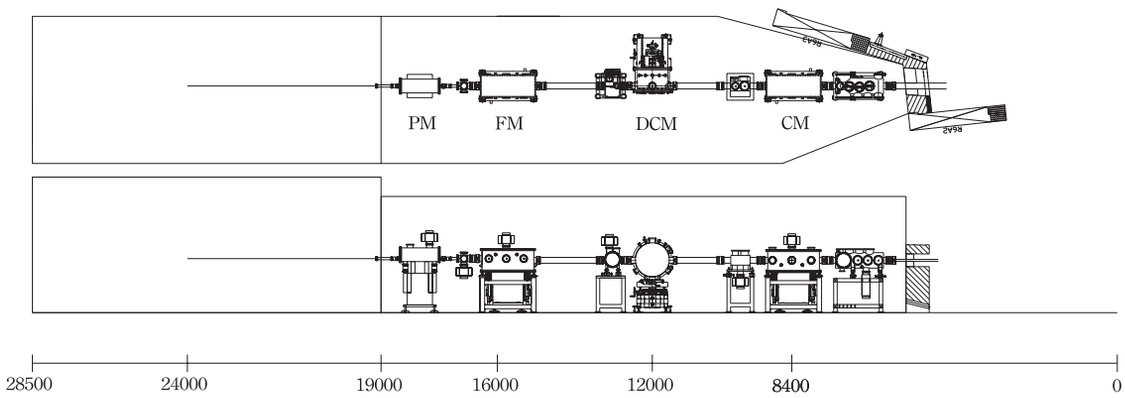
光束線配置

此光束線的光學系統配置如圖一、光束線實體配置如圖二所示，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）、聚焦鏡（Focusing Mirror，FM）與過濾高次諧波(High Harmonic Waves)的平面鏡(Plane Mirror，PM)。因考慮實驗量測上的多樣性，本光束線設有三個實驗站，在距光源21.5公尺處是吸收光譜實驗站，在24公尺的最佳聚點上是散射與繞射的實驗站，在26公尺處是高磁場(~12 T)及低溫(~2 K)的磁散射實驗站。

張世法、曾金榮+、劉金炎、莊瑞明、張劍虹、鍾世俊（光束線組、主任室+）



圖一 BL07A光學系統配置圖；上半圖是不加入平面鏡的情形；下半圖是加入平面鏡的情形



圖二 BL07A光束線實體配置圖

超導多極增頻磁鐵光源所產生的光束通過濾光鈹薄膜(Be Filter)後，濾掉低能量光子以減少下游光學元件之熱負載，再以水冷式限光器選取所需要2 mrad光束，接著由距光源8.4公尺處的圓柱形(Cylindrical)準直鏡將光束垂直方向的張角（Divergence）消去，即儘可能將光源變成平行光。再經一面分隔真空的鈹窗（Be Window），由距光源12公尺處的非色散式Si（111）雙晶體單光器分光，此單光器不但可以作快速能量掃描及提供高能量解析度的光束，並維持光束固定出口高度以保持樣品位置固定。分光後之光束有兩種不同的模式，一種是經由距光源16公尺處的環形(Toroidal)聚焦鏡，將光聚到距光源24公尺處的實驗站，提供吸收光譜實驗站及X光散射/繞射兩實驗站使用；另一種是經由環形聚焦鏡加上18公尺處過濾高次諧波的平面鏡，將光聚至距光源26公尺處的實驗站，提供磁散射實驗站使用。

吸收光譜實驗站因不在聚焦點上成像較大，但其樣品也較大所以成像尺寸不至造成實驗量測時的困難，若考慮以可變曲率的環形聚焦鏡來縮小吸收光譜實驗站之成像是不可行的，因爲改變入射角會大幅減少所能使用的能量範圍，這對實驗非常不利；在X光散射/繞射的實驗站水平方向的聚焦比例（物距/像距）是2，成像最爲對稱，故是最佳的聚焦點，在許多實驗的數據分析上這是極爲重要的優點；在最佳聚焦點之後的磁散射實驗站聚焦光束會有較小的發散角，再加上平面鏡過濾高次諧波，能達到高次諧波貢獻少於萬分之一的比例。

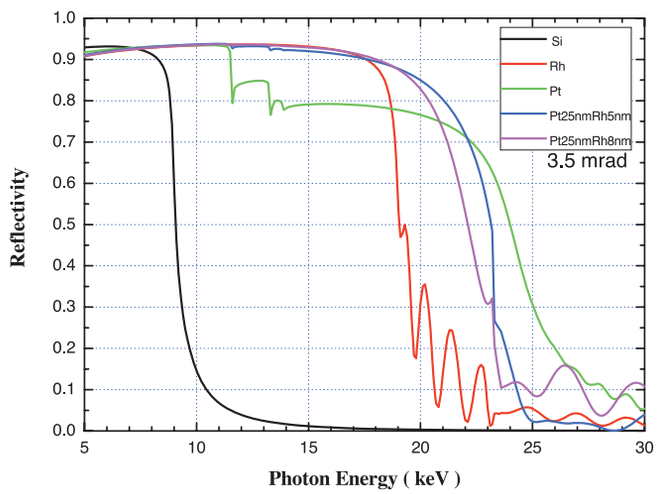
入射角與鏡面材質的選擇

不同的入射角所能到達樣品處的光通量也不同，假設不改變光學元件擺放的位置，不同的入射角除了反射率不同外，還會讓準直鏡和聚焦鏡因鏡長在垂直接收角的範圍上不同，同時又會改變聚焦鏡水平方向的曲率。如果水平方向的曲率變大再加上入射角變大，幾何上明顯的可以看出水平所能收到的光束會變多，因此在不考慮反射率只考慮幾何因素時，入射光束與鏡面所夾的入射角愈大愈好。但光束與鏡面夾的入射角變大時，鏡子反射之臨界能量(Cut Off Energy)卻會變小，換句話說就是實驗上所能用的能量範圍會愈小，因此並不全然是入射角大就好，幾何因素和反射率之間須取得平衡。

光束能量範圍最佳化取決於光束的入射角度外還有光學鏡面材質的反射率。圖三顯示數種常用反射X光的鏡面，如矽

（Si）、鉑（Pt）與銠（Rh）在不同入射角時的反射率。在同一入射角，鉑材質的鏡面可適用較高的能量範圍，但鉑的反射率在能量11 keV 至14 keV之間有一些吸收結構，這會影響高精密光譜實驗之量測，故一般除了大範圍高能量的需求外，大都較喜歡鍍銠之鏡面，但最近新的方法是在鏡面上鍍上一鉑層後再鍍上銠層，鉑之上的銠層會抑制鉑在11 keV 至14 keV 之間的吸收結構。

模擬8種不同的入射角分別對5種不同材質間的相對關係，考慮反射率造成的有效反射能量範圍、FM曲率所限制的收光量及高次諧波分量之貢獻等三種因素，用來作爲決定鏡面入射角及材質的判斷要素。最後選擇如圖三的藍線，以矽爲基材並在鏡面鍍上25 nm 鉑層與5 nm銠層，如此有較寬的可用能量範圍及25 keV以上的反射率小兩項優點，可適用於IASW光源寬廣的能量範圍（5-23 keV）。



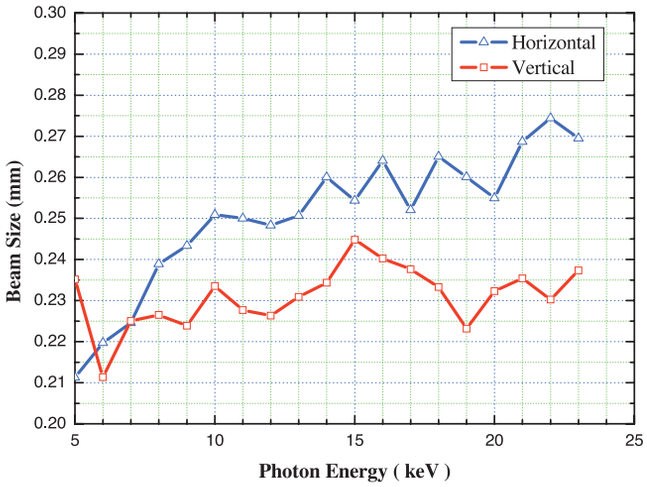
圖三　入射角爲3.5 mrad時，Si、Rh、Pt、Pt 25 nm + Rh 5 nm與Pt 25 nm + Rh 8 nm五種不同材質的反射率。

因此準直鏡上一半表面維持矽的基材，提供反射5-8 keV低能量範圍，另一半鍍上25 nm 鉑層與5 nm銠層，提供反射8-23 keV高能量範圍；聚焦鏡因形狀之故只能鍍鉑銠多層膜一種鏡面，如此組合能有效阻隔高次諧波的貢獻小於0.2 %，但若要再小於萬分之一則需再加一面平面鏡，其鏡面也如準直鏡區分爲兩個區域。

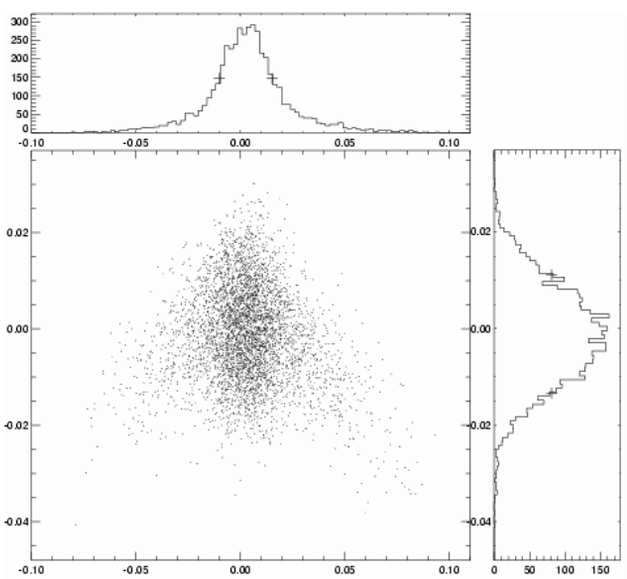
最佳聚焦點的尺寸及成像

將計算出的光學參數輸入光束循跡模擬程式，模擬光束線成像並估算光束聚焦點的尺寸、能量解析度及光通量的大小。聚焦光束於最佳聚焦點的大小皆小於0.3 mm×0.3 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，但會損失部分的光通量。

不同能量在距光源24公尺處最佳聚焦點上成像的尺寸如圖四所示，在15 keV時最佳聚焦點成像如圖五所示。



圖四　各種能量的光束在最佳聚焦點處成像尺寸

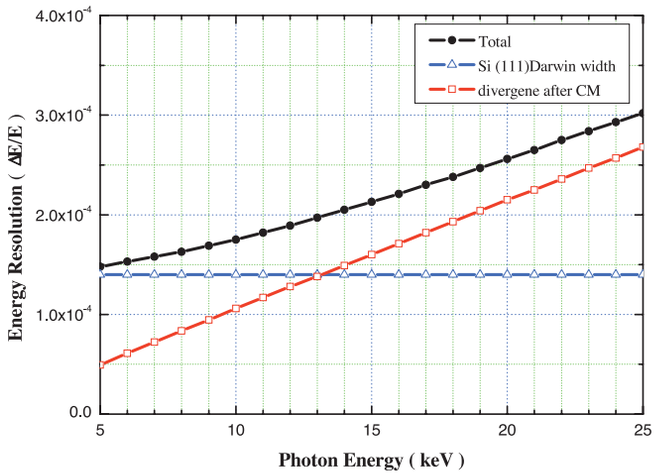


圖五　15 keV光束在最佳聚焦點的成像(單位：cm)

光通量與解析度

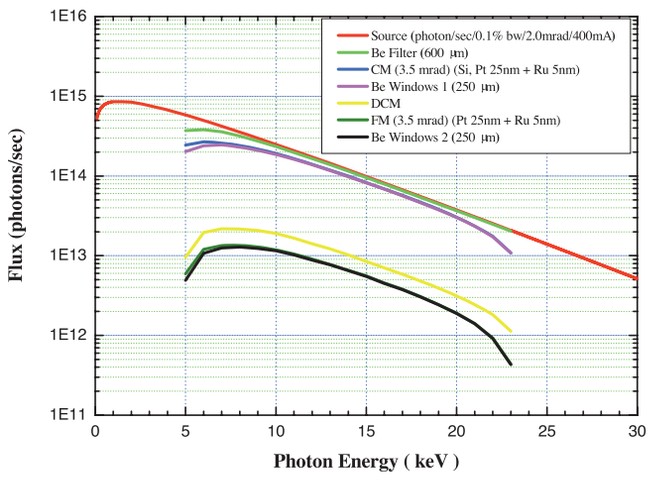
決定光束能量解析度的主要因素有二：一是矽晶體本身固有的X光繞射道爾文寬度，另一是光束進入分光儀前的光束垂直發散角。根據光束循跡程式模擬結果顯示，光束經過第一面圓柱型準直鏡後的光束垂直發散角大約爲2.13×10^{-5}rad ，此值大部分是因光源爲非點光源所造成的。將此值代入布拉格定律（Bragg's law），即可估算出其對能量解析的影響。圖六表示BL07A光束線各能量的能量解析度，其中清楚顯示，由於光源大小以及與分光儀晶體的關係造成的光束發散度決定了光束線的能量解析度（ΔE/E），這值大約介於1.5×10^{-4}到2.75×10^{-4}之間。能量解析度可用減少光束的垂直接收角度有效地提高，但如此將損失部分光通量。

BL07A的光束會經過鈹濾光薄膜(600 μm)、CM、鈹窗(250 μm)、DCM、FM，最後再經一個阻隔眞空與大氣的鈹窗(250 μm)後才到達樣品的位置。光束每通過一個光學元件，因穿透、反射和繞射等各種過程而減少光通量，利用光束循跡模



圖六 能量解析度與能量間的關係圖

擬程式模擬的結果，加上濾光薄膜與鈹窗材料的衰減常數，以及準直鏡、聚焦鏡的鏡面反射率等參數，計算光束經過每一個元件後所通過光通量如圖七所示。在實驗站的光子通量在 4.3×10^{11}-1.2×10^{13} Photons/sec/2.0 mrad/400 mA，如果再考慮磁散射實驗站加入平面鏡(PM)的情形，會再損失約8-9 %的光通量。



圖七 光通量與能量間的關係圖

工作成果與預定進行之事項

這條光束線自今年年初訂定需求後，經光束循跡模擬程式模擬成像，接著計算光通量與能量解析度等光束線特性，現正進入光學元件熱分析與實體設計的階段，並同時進行部份元件發包、製作與採購等工作。

從計畫執行至今，學生訓練的課程已由基礎光學原理、同步輻射的應用、光束循跡模擬程式的學習、光束線特性的計算，循序漸進到制定鏡子、鏡箱與雙晶體單光器等元件的規格，再來即將進入詢價與採購的階段，大部份學生反應狀況都十分良好。

另外經費使用方面，預計今年將提出光束線上的鏡子、鏡箱與雙晶體單光器等最重要元件的採購案，因這幾項元件交貨期需長達八至十個月，時程上須先進行採購的作業，其它剩餘經費再採買真空計、幫浦、馬達等所需元件。明年所編列的經費將進行輻射屏蔽防護體的建造、真空腔體體與支架的製作，以及採買製作可短期交貨的元件等多項工作，如此一來才能於明年年底前順利完成光束線的建造與試俥的工作。

參考文獻：

[1] C. S. Hwang, *et al*., AIP CPC05, Synchrotron Radiation Instrumentation 8th Intl. Conference, 199 (2004).

[2] 李志浩,杜昭宏,張石麟,黃炳照,張經霖,彭維鋒,劉如熹,蘇雲良等，"A Proposal for the Construction of an Advanced X-ray Scattering Beamline for Materials Science Research", (2006).

[3] C. Welnak, G. C. Chen and F. Cerrina, Nucl. Instr. and Meth. **347**, 344 (1994).

[4] B. Lai and F. Cerrina, Nucl. Instr. and Meth. **A246**, 337(1986).

[5] J. Feldhaus, “Soft X-Ray Optics and Technology”, 242/SPIE **733**, (1986) .

[6] T. E. Dann and *et al*., "Conceptual design report for 1~5 keV beamline at SRRC", SRRC/RBM/IM/94-07,(1994).